

## NATIONAL INSTITUTE FOR FUSION SCIENCE

第6回「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」及び  
核融合科学研究所共同研究「大型シミュレーション研究」  
合同研究会 集録

Proceedings of Joing Meeting of the 6<sup>th</sup> Simulation Science Symposium and  
the NIFS Collaboration Research "Large Scale Computer Simulation"

(Received - Feb. 19, 2003 )

NIFS-PROC-52

Mar. 2003

This report was prepared as a preprint of work performed as a collaboration reserch of the National Institute for Fusion Science (NIFS) of Japan. This document is intended for infomation only and for future publication in a journal after some rearrange-ments of its contents.

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to the Research Information Center, National Institute for Fusion Science, Oroshi-cho, Toki-shi, Gifu-ken 509-5292 Japan.

**RESEARCH REPORT**  
**NIFS-PROC Series**

第6回「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」及び  
核融合科学研究所共同研究「大型シミュレーション研究」合同研究会  
集録

**Proceedings of Joint Meeting of the 6<sup>th</sup> Simulation Science Symposium and  
the NIFS Collaboration Research “Large Scale Computer Simulation”**

Key word: computer simulation

Abstract

Joint meeting of the 6<sup>th</sup> Simulation Science Symposium and the NIFS Collaboration Research “Large Scale Computer Simulation” was held on December 12-13, 2002 at National Institute for Fusion Science, with the aim of promoting interdisciplinary collaborations in various fields of computer simulations. The present meeting attended by more than 40 people consists of the 11 invited and 22 contributed papers, of which topics were extended not only to fusion science but also to related fields such as astrophysics, earth science, fluid dynamics, molecular dynamics, computer science etc.

## はじめに

この冊子は、平成14年12月12日（木）および13日（金）にかけて核融合科学研究所において開催いたしました、第6回「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」及び核融合科学研究所共同研究「大型シミュレーション研究」合同研究会で発表された内容を集録したものです。

これまで核融合科学研究所理論・シミュレーション研究センターでは、5回にわたり「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」を開催して、計算機シミュレーションというアプローチを機軸にした新しい方法論を開拓するための議論の場を設けて参りました。今年度、第6回目となるシンポジウムでは、プラズマ、天体、流体、物質科学、生命科学、等々、様々な研究分野の先生方に最近のシミュレーション研究による成果の一端をご紹介いただくと共に、(1) 各分野における中心的な命題とそのモデリングにおける課題、(2) シミュレーション手法上の問題、(3) シミュレーション研究に不可欠な解析・可視化・表現法上の課題や、(4) さらにには計算機技術を含めた最近の進展、などについて、それぞれご専門の先生方から、他分野の研究者にも分かりやすくご講演いただきました。

また、核融合科学研究所共同研究「大型シミュレーション研究」は、核融合科学研究所に設置されているスーパーコンピュータを中核とする「大型シミュレーション研究用解析装置」を用いた共同研究であり、本合同研究会は平成14年度の研究成果報告会を兼ねております。

参加者の皆様方には、今回の研究会を、シミュレーションという共通言語を介した分野横断的な交流が今後いっそう発展するための、一助としていただければ大変ありがたく存じます。また、ご多忙にも関わらず、研究発表および集録原稿の執筆をいただきました皆様方に、この場を御借りして厚く御礼申し上げます。読者の方々には、この集録を通じて、シミュレーション科学の広がりや発展を感じ取っていただければ何よりです。

平成15年2月

核融合科学研究所  
理論・シミュレーション研究センター  
林隆也

## 目次

合同研究会プログラム	1
地球シミュレータ上での気候変動予測 高橋桂子	4
Simple protein models – collapse, folding and glass transitions Y.Hiwatari and A.Baumketner	8
生体分子の分子動力学シミュレーション：古典から量子へ 古明地勇人	12
ナノシミュレーション技術の研究開発と有機分子集合体への応用 — 分子コンピュータ を目指して— 三上益弘	14
多階層的モデリングとシミュレーションプラットフォーム 土井正男	20
乱流のUltra Simulation 石原卓, 金田行雄, 横川三津夫, 板倉憲一, 宇野篤也	24
乱流秩序渦構造による混合現象の理解 後藤晋, 木田重雄	28
没入型VR 装置におけるボリュームレンダリング実行環境の開発 大野暢亮, 田村祐一, 佐藤哲也	32
テクスチャマッピング・ボリュームレンダリングを利用した 人体CT 画像の没入型 VR 三次元表示 博田竜史, 長谷川建治, 菅信一, 大野暢亮, 田村祐一, 陰山聡, 堀内利得	34
分子動力学を用いた 子顕微 三次元像からの原子モデル構築への試み 安永卓生, 野田和弘	40
電流不安定性の非線形発展と <sup>3</sup> He イオンの選択的加速 樋田美栄子, 奥村隼人	43
衝撃波多段加速の相対論的効果と統計的性質 宇佐見俊介, 大澤幸治	45
Complexity in a High Intensity Laser-Plasma Interaction Lj.Nikolic, S.Ishiguro, M.M.Skoric, and T.Sato	48
太陽フレアにおける磁気リコネクション・ジェットの内外部衝撃波 田沼俊一, 柴田一成	52
3次元開放系におけるプラズマ不安定性と無衝突磁気リコネクション 堀内利得	54
弱衝突性イオン温度勾配型乱流の数値シミュレーション 渡邊智彦, 洲謙英雄	57
Nonlinear simulation of multi-scaled ITG turbulence in shearless slab geometry 矢木雅敏	60

磁場反転配位における形状緩和と傾斜不安定性 大谷寛明, 堀内利得, 佐藤哲也	63
球状トカマクの非線形MHDシミュレーション 水口直紀, 林隆也	68
アルヴェン固有モード周波数掃引の計算機シミュレーション 藤堂泰, 篠原孝司, 武智学, 石川正男	70
両親媒性分子膜の散逸粒子動力学シミュレーション 中村浩章, 藤原進	72
希薄溶液中における高分子構造形成の分子動力学シミュレーション 藤原進	76
固体表面上におけるナノクラスターのロングジャンプ拡散 丸山 豊	79
Numerical Simulation of Shielding Current Density in HTS by Element-Free Galerkin Method Atsushi Kamitani, Soichiro Ikuno, and Hiroaki Nakamura	83
Iterative Solution for Linear System Obtained by Meshless Approach Soichiro Ikuno, Atsushi Kamitani, and Hiroaki Nakamura	85
ヘリカル系プラズマの自由境界MHD平衡計算 鈴木康浩, 林隆也, 中村祐司, 近藤克巳, D. A. Monticello, A. H. Reiman	87
$m/n = 1/1$ 磁気島をもつ3次元MHD平衡解析 菅野龍太郎, 中島徳嘉, 岡本正雄, 林隆也	91
LHDプラズマにおけるMHD非線型解析 市口勝治	93
LHDフルトラスシステムの非線形MHDシミュレーション 三浦英昭	96

「第6回シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」及び  
核融合科学研究所共同研究「大型シミュレーション研究」合同研究会 プログラム

日 時：平成14年12月12日（木）13:30-13日（金）17:30

場 所：核融合科学研究所管理棟4階大会議室

12月12日（木）

13:30-13:35 あいさつ

#Session A (座長：堀内 利得)

13:35-14:00 佐藤 哲也(地球シミュレータセンター)

"地球シミュレータとシミュレーション革命"

14:00-14:45 高橋 桂子(地球シミュレータセンター)

"地球シミュレータ上での気候変動予測"

14:45-15:30 高部 英明 (阪大)

"数値天文台:高階層・物理複合型・観測密着型に依拠した宇宙全史の解明への挑戦"

#Session B (座長：草野 完也)

15:40-16:25 富阪 幸治(天文台)

"自己重力による構造形成：多重格子法を用いた星形成過程のシミュレーション"

16:25-17:10 樋渡 保秋(金沢大)

"タンパク質の理想物理モデル：Collapse, Folding, Freezing"

17:10-17:55 古明地 勇人 (産総研)

"生体分子の分子動力学シミュレーション：古典から量子へ"

12月13日(金)

#Session C (座長：林 隆也)

9:00-9:45 三上 益弘(産総研)

"ナノシミュレーション技術の開発と有機分子集合体への応用"

9:45-10:30 土井 正男(名大)

"多階層的モデリングとシミュレーションプラットフォーム"

10:45-12:15 ポスター・セッション

#Session D (座長：三間 圀興)

13:30-14:15 岸本 泰明(原研)

"プラズマ生成・緩和過程を考慮した統合化粒子コードと応用研究"

14:15-15:00 石原 卓(名大)

"乱流の Ultra Simulation"

15:00-15:45 後藤 晋(核融合研)

"乱流秩序構造による混合現象"

16:00-17:30 新システム説明会

— ポスター発表一覧 —

01. 大野 暢亮 (核融合研)

没入型 VR 装置におけるボリュームレンダリング実行環境の開発

02. 博田 竜史 (北里大)

テクスチャマッピング・ボリュームレンダリングを利用した人体CT画像の没入型 VR  
三次元表示

03. 安永 卓生 (九州工大)

分子動力学を用いた、電子顕微鏡三次元像からの原子モデル構築へ向けて

04. 樋田 美栄子 (名大)

電流不安定性の非線形発展と  $3\text{He}$  イオンの選択的加速

05. 宇佐美 俊介 (名大)

衝撃波多段加速の相対論的効果と統計的性質

06. Nikolic, L. V. (総研大)

Complexity in a High Intensity Laser-Plasma Interaction

07. 田沼 俊一 (京大)

太陽フレアにおける磁気リコネクション・ジェットの内側衝撃波

08. 堀内 利得 (核融合研)

3次元開放系におけるプラズマ不安定性と無衝突磁気リコネクション

09. 渡邊 智彦 (核融合研)

弱衝突性イオン温度勾配型乱流の数値シミュレーション

10. 矢木 雅敏 (九大)

Nonlinear simulation of multi-scaled ITG turbulence in shearless slab geometry

11. 大谷 寛明 (核融合研)

磁場反転配位における形状緩和と傾斜不安定性

12. 水口 直紀 (核融合研)

球状トカマクの非線形 MHD シミュレーション

13. 藤堂 泰 (核融合研)

アルヴェン固有モード周波数掃引のシミュレーション

14. 中村 浩章 (核融合研)

脂質二分子膜の散逸粒子動力学法シミュレーション

15. 藤原 進 (京都工繊大)

希薄溶液中における高分子構造形成の分子動力学シミュレーション

16. 丸山 豊 (産総研)  
固体表面上におけるナノクラスターのロングジャンプ拡散
17. 神谷 淳 (山形大)  
Element-Free Galerkin 法による HTS 板中の遮蔽電流密度シミュレーション
18. 生野 壮一郎 (東京工科大)  
Meshless approach より得られる連立一次方程式の反復解法
19. 鈴木 康浩 (京大)  
ヘリカル系プラズマの3次元自由境界 MHD 平衡計算
20. 菅野 龍太郎 (核融合研)  
 $m/n=1/1$  磁気島をもつ3次元 MHD 平衡解析
21. 市口 勝治 (核融合研)  
LHD プラズマにおける MHD 非線型解析
22. 三浦 英昭 (核融合研)  
LHD フルトーラスシステムの非線形 MHD シミュレーション



# 地球シミュレータ上での気候変動予測

高橋桂子 (地球シミュレータセンター)

## 1. はじめに

地球シミュレータ上では、そのパワフルな計算機資源を有効に利用することにより、従来手がけることができなかった超高解像度かつ長期の積分を行なうことが可能となる。大気、海洋、海氷の相互作用が、気候変動の要因に非常に重要な役割を果たしていることは、これまでの多くの知見から疑う余地はなく、この相互作用を直接扱うことが可能である大気・海洋・海氷結合モデルは、気候変動の機構解明のため、ひいては気候変動予測には不可欠である。

現在、地球シミュレータセンターでは、大気大循環モデル (Atmospheric General Circulation Model for the Earth Simulator: AFES)、海洋大循環モデル (Oceanic General Circulation Model for the Earth Simulator: OFES) と、大気・海洋・海氷結合モデル (Coupled Atmosphere-Ocean-Sea ice Model for the Earth Simulator: CFES) を開発している。結合モデル

を構成するそれぞれのコンポーネントは、既に地球シミュレータの計算性能を最大限に生かすように計算効率を最適化してあり、加えて、CFES では、従来の結合手法よりもさらに並列化された実装がなされている。本稿では、これら AFES, OIFES, CFES の各モデルの概要とシミュレーション結果、加えて、今後予定している結合モデルによる気候変動予測のためのシミュレーションについて概要を述べる。

## 2. モデルの概要と検証結果

### 2.1 大気大循環モデル:AFES

AFES は、東京大学気候システム研究センターと国

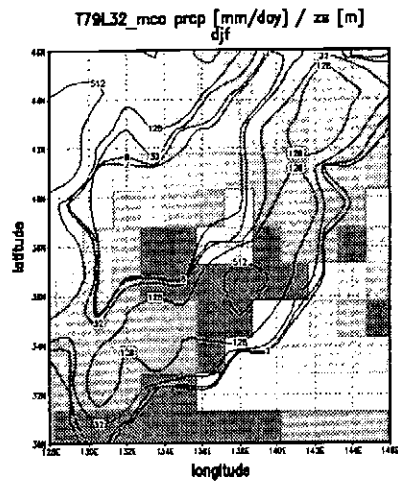
立環境研究所で開発された大気大循環モデルをベースに、地球シミュレータ用に計算効率最適化されたコードである。AFES は、鉛直方向の運動方程式において加速度項を省略し静力学平衡を仮定したプリミティブ方程式を採用している。静力学平衡を仮定したことにより、ノイズや計算不安定の原因となる音波のみを除去し重力波は含めることができる。さらに、放射過程、積雲対流過程のパラメタリゼーション、鉛直乱流混合過程を含んでいる。静力学平衡の仮定が成り立つ限界とされる約 10km の水平スケールのシミュレーションを地球シミュレータ上でを行い、メソスケールの現象をも再現できる可能性を示した (図 1)。低解像度と高解像度の降水パターンを日本付近について比較すると、地形の再現はもちろん、降水パターンも現実に近いものとなることがわかる (図 2)。

### 2.2 海洋・海氷大循環モデル:OIFES

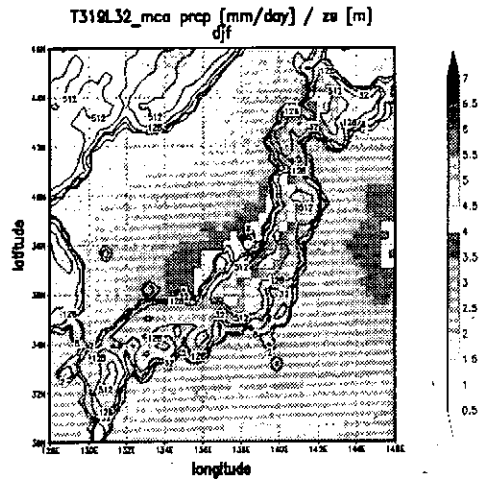
海洋・海氷結合モデル (OIFES) を構成するコンポーネントは、3次元海洋大循環モデルと2次元海氷モデルである。海洋大循環コンポーネント OFES は、GFDL (Geophysical Fluid Dynamics Laboratory, NOAA, USA) で開発された MOM3 をベースに、地球シミュレータ用に計算効率を最適化した海洋モデルである。AFES と同様、静力学平衡を仮定し、現実的な海底地形を用いて、鉛直混合や対流を表現するパラメタリゼーションを用い、3次元の流速分布、温度分布、塩分分布を求めることができる。アラスカ地球フロンティア研究システムの研究者と協力して、この OFES に海氷を粘弾性・塑性体として扱う海氷モデルも導入している。



図 1. 水平約 10km 格子による AFES のシミュレーション結果。白色の分布は降水量を示す。



(a) 水平約 140km の解像度の降水分布



(b) 水平約 40km の解像度の降水分布

図 2. 冬季の日本付近の降水分布

OIFES のコンポーネントである海洋大循環モデルを、単独で 50 年積分した結果を示す。静止、年平均場状態から開始し、境界条件として海表面温度 (SST)、海表面塩分濃度、風応力の月平均気

候値データ (WOA98) を与えて駆動した。図 3 は、75N-75S 領域における水平解像度 0.1 度(10km)、鉛直 54 層で設定したモデルの、50 年積分の 45 年 10 月 15 日(モデル時間)のスナップシ

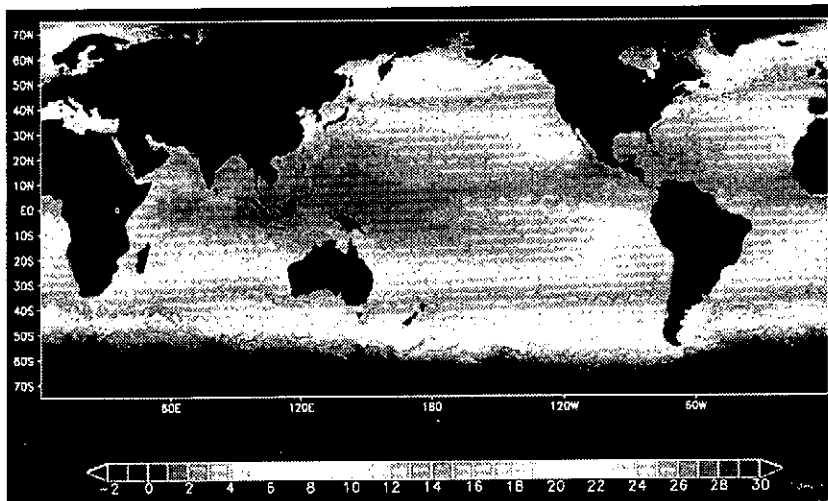


図 3. 45 年 10 月 15 日モデル時間における海表面温度

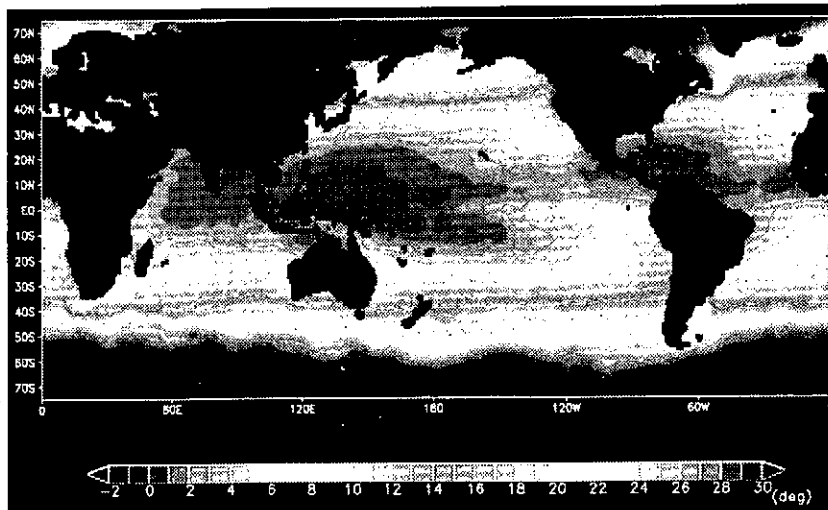


図 4. WOA98 より 10 月の月平均値 (観測値)

ョットである。海洋大循環の熱的エネルギーの輸送において、非常に重要とされる渦が解像されることがわかる。また、現象として、非線形性が顕著である黒潮の離岸や、ガルフストリームについても非常によく再現されていることがわかる。図4に示した観測値(WOA9810月のSSTの月平均値)と比較しても遜色ない。

海氷コンポーネントを加えた場合でも、海氷の分布は、観測値と比較しても妥当な分布が得られることを確認している(図5)。

### 2.3 大気・海洋・海氷結合モデル:CFES

大気・海洋・海氷結合モデル(CFES)を構成するコンポーネントは、上記で示した3次元大気大循環モデル:AFES、3次元海洋大循環モデルと2次元海氷モデルからなるOIFESである。CFESは、AFES中で計算された物理量( ; heat flux, fresh water flux, momentum flux)を、カップラと呼ばれる変換ルーチンを通してOIFESに受け渡す。それらの物理量を境界条件として、OIFES上で物理過程、ダイナミクスを計算する(図6)。

各コンポーネントモデルは、地球シミュレータ上で効率的な計算ができるようにプログラムを最適化してあるので、最適化の結果は、それぞれ、AFESは99.99%、OIFESは99.89%の並列化率を達成している。これらの高効率な計算効率を損なうことなく、各コンポーネントを結合してCFESを構築している。

また、従来の結合モデルは、計算機資源による制限から、大気、海洋大循環モデルのコンポーネントをシーケンシャルに行っていたが、この結合手法では、海洋大循環モデルに用いられる境界値が時間スプリットに依存し、物理的な相互作用をコンシステントに扱うことができない。一方、計算効率においても、従来のほとんどの結合モデルにおいて、物理量の交換をシーケンシャルに、かつシングルプロセッサだけに任ずことになっており、データの受/送信の集中による並列計算効率の劣化が、非常に大きな問題になる。

以上2つの問題を回避するために、本結合モデルCFESにおいては、大気、海洋それぞれのコンポーネントモデルが、非同期に実行可能であるように構築した(図7)。このことにより、大気と海洋モデル間における時間スプリットの差異を回避でき、物理的に、よりセルフコンシステントな相互結合を実現した。物理量の交換部は、すべて並列的に処理するように構築したため、データ受/送信部においては、集中回避による計算効率の向上も実現した。実際には、各コンポーネントモ

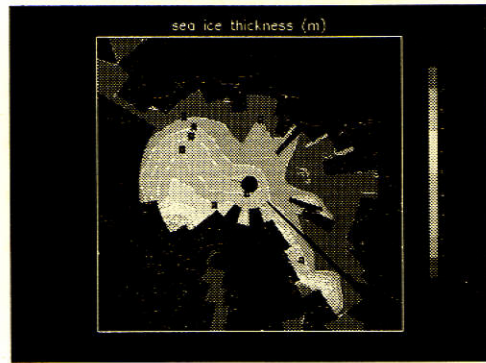


図5 海氷を導入したシミュレーション結果。海氷の厚さ(m)分布を示す。

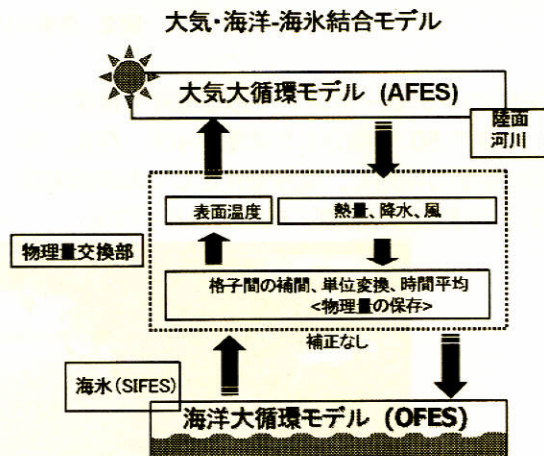
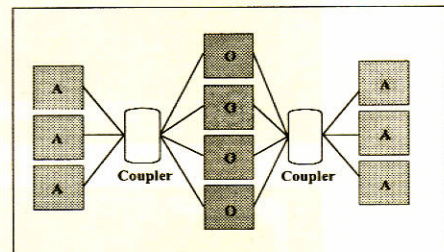
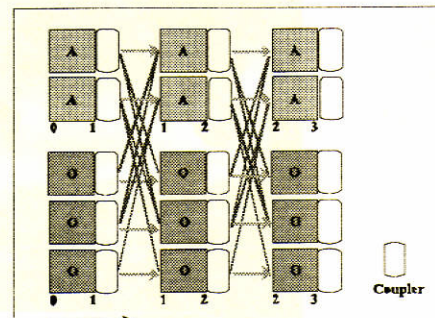


図6. 大気・海洋・海氷結合モデルCFESの構成



(a)従来の結合手法



(b)CFESの結合手法

図7. 結合モデルの結合手法

デルは独立のプロセスとして非同期に実行するので、コンポーネントごとの計算を行うプロセッサ数を制御することにより、結合モデル全体の計算性能を向上させることができる。

CFES は、既に地球シミュレータ上に実装を完了しており、現在、物理的検証と計算効率の両面から検証を進めている。CFES を用いて計算した結果を図 8 に示す。水平約 100km の解像度の結果であるが、結合モデルの数値実験としては、世界初の試みである。図 8 は、海洋が受け取る熱フラックスの分布を示している。大気の状態を反映した、これまでの解像度では表現できなかった構造がはっきりと示されている。また、図 9 は、海洋表層部の循環に支配的な影響を与える海上の風の curl である。この風の場合、これまでは表現できなかった詳細な構造を示している。これらの詳細構造が、従来の結合モデルと比較して、どれほどの意義をもつものなのか、物理的な検証を現在進めている。

### 3. 今後の研究計画

今後の研究対象としては、超高解像度で数年から数十年スケールの気候変動予測の可能性を探る。特に、エルニーニョによる気候変化、それらが日本の気候にどのような影響を及ぼすか、また、温暖化現象により、エルニーニョ等の気候変動がどのような影響を受けるかなどを、日本内外の研究者とも協力して推進してゆく予定である。また、解像度を多少とも落として、数 1000 年から数万年の古気候変動についての再現、温暖化/寒冷化などの気候変動機構の解明に向けた試みも行う予定である。古気候変動については、アイスコア、珊瑚、海底堆積物などの化学的分析により古気候変動についての興味ある知見が得られてきている。これらの知見とも連携した研究を進めていくことを検討している。

最後に、地球シミュレータセンターでは、これまで開発したコード、およびシミュレーション結果を公開してゆく予定である。ご興味のある方は、是非ともご参加いただきたい次第である。

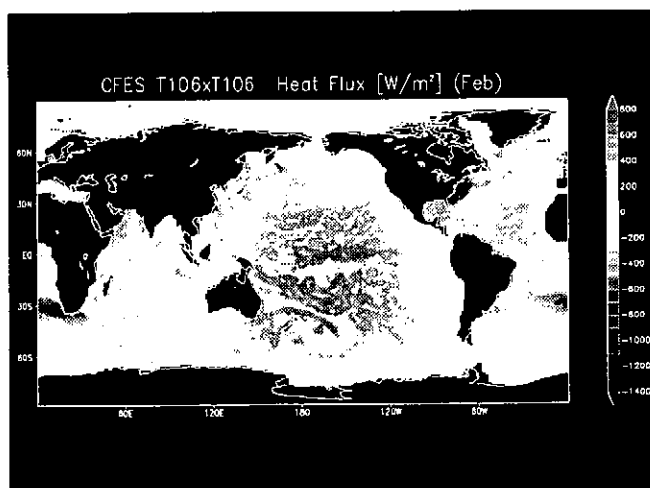


図 8. 海洋が大気から受け取る熱フラックス

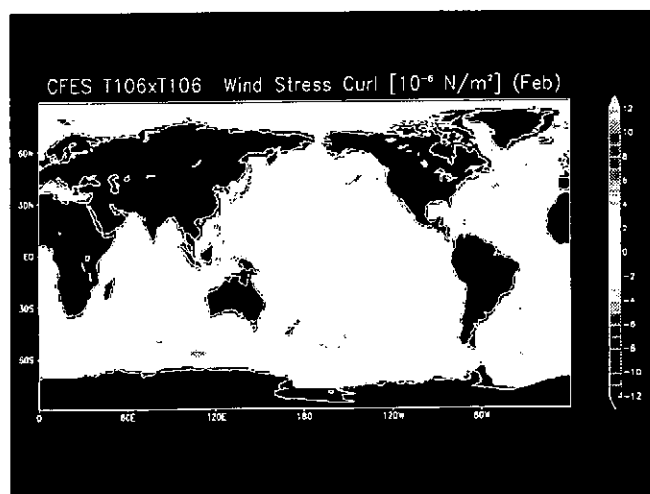


図 9. 海上風の curl の分布

# Simple protein models - collapse, folding and glass transitions

Y. Hiwatari and \*A. Baumketner

Faculty of Science, Kanazawa University, Kakuma, Kanazawa, 920-1192, Japan

This paper is concerned with an investigation of the protein folding problem by molecular dynamics simulations performed with minimal protein models. We demonstrate the usage of our models and computational methods by investigating thermodynamics and kinetics of a short  $\beta$ -sheet and  $\alpha$ -helix protein motifs. From thermodynamical points of view we determine three basic phase transition temperatures that may take place in the  $\beta$ -sheet protein model: collapse, folding and freezing temperatures. It can be shown that kinetics the folding reaction of the employed model is well described by a proposed analytical diffusion-equation formula.

The  $\beta$ -sheet protein model consists of a string of 16 beads placed at the positions of  $C_\alpha$  and interlinked by virtual bonds of a fixed length. The beads, or monomers, are intended to mimic entire amino acid residues in actual proteins. In the model, the monomers can be either hydrophobic or neutral, depending on whether they attract each other or repel. There is a total of 12 hydrophobic residues and 4 neutral residues in the model. The potential energy function operating among the monomers comprises a number of interactions such as bending, torsion and Lennard-Jones potentials. It is optimized in a way to make a  $\beta$ -sheet motif the ground state conformation of the model. Molecular dynamics simulations in the multicanonical ensemble were applied to generate potential energy histograms as well as joint potential energy and structural overlap function histograms for the model. This represents an order parameter to distinguish between native and unfolded states. Along with  $E(T)$  (potential energy) and  $\chi(T)$  the fluctuations of these quantities, i.e., the specific heat  $C_v = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)/k_b T^2$  and susceptibility  $\Delta\chi = \langle \chi^2 \rangle - \langle \chi \rangle^2$ , where angular brackets denote statistical averaging, are best suited for identification of transition temperatures. It is shown that the maximum of the specific heat  $T_c$  indicates a collapse transition. The maximum of the susceptibility  $\Delta\chi$  indicates another phase transition,  $T_f$ . It follows that the temperature  $T_f$  marks the point where a transition from a subset of disordered states with low similarity to the native state into a subset of conformations with high native-state similarity occurs. In other words, temperature  $T_f$  can be associated with the temperature of folding. The relevance of the transition temperatures calculated lies in their fundamental thermodynamic characteristics measurable in laboratory experiments. Once some meaningful values are adopted for the potential energy parameters, computer simulations can be used to estimate these important characteristics on the basis of minimal protein models.

Another essential thermodynamic characteristics of proteins that can be evaluated from minimal models is the temperature of glass transition. Dramatic qualitative changes may occur in proteins upon undergoing a glass transition, for instance loss of their biological functions. By definition, the glass transition corresponds to the temperature where the configurational entropy  $S_c(T)$  of the protein vanishes. It follows that in the present model the glass transition occurs at  $T_K$ . At higher temperatures the molecule chooses to visit also other parts of the conformations space instead of staying in the neighborhood of the native conformation, while at sufficiently lower temperatures than  $T_K$  there remains only one potential energy basin thermally accessible to the model.

---

\*Permanent address: Institute for Condensed Matter Physics, 1 Svientsitsky Str., Lviv 79011, Ukraine, E-mail: andrij@icmp.lviv.ua

## FOLDING PROBLEM

- When proteins are placed in a cold solvent whose temperature is lower than some critical temperature  $T_f$ , that is subjected to folding conditions, they spontaneously acquire three-dimensional shapes or fold.
- Seminal experiments of Anfinsen [Science 181 (1973) 223] demonstrated that the final folded conformations do not depend on the details of the process by which the folding conditions are imposed. This observation gave rise to a conceptual dogma stating that *3D structure of a folded protein is encoded by the protein's primary structure alone and corresponds with the free energy minimum.*
- The problem of how a one-dimensional amino acid sequence translates into the three-dimensional protein structure is called *the protein folding problem.*
- The Anfinsen dogma opens wide the door for computational predictions of tertiary structures from primary structures at least *conceptually.* Given appropriate potentials for all atoms comprising the protein and surrounding solvent molecules the folded state can be found by integrating equations of motion numerically. In cases where some chemistry is going on, quantum mechanical methods can be used.
- On the *practical side* the problem turns out to be very complicated even in the classical limit.

## β-SHEET MODEL

Hydrophobic force:

$$V_{HH} = 4e_h[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$$

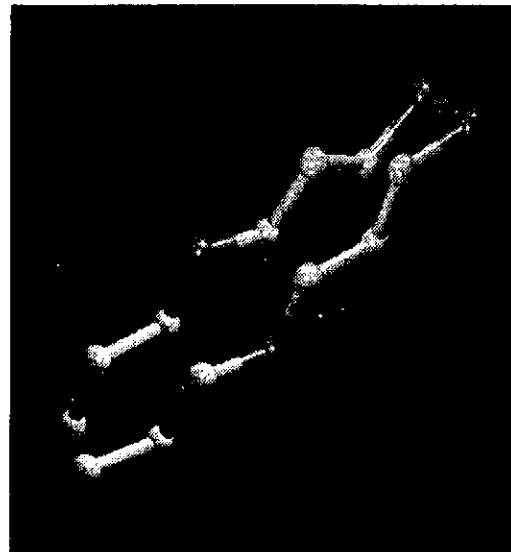
$$V_{N\alpha} = 4e_h[(\sigma/r)^{12}] \quad \alpha = H \text{ or } N$$

Torsion angle:

$$V(\phi) = A(1 + \cos(\phi)) + B(1 + \cos(3\phi))$$

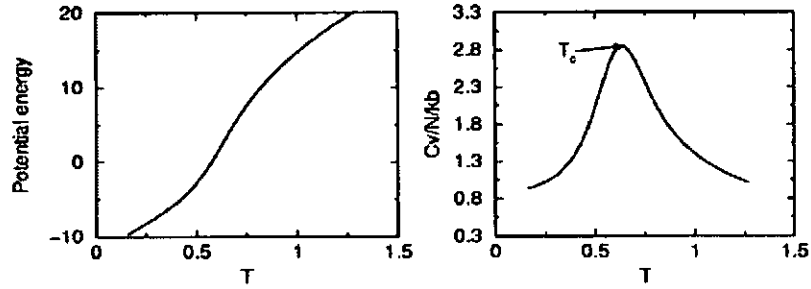
Bond angle:

$$V(\theta) = k_\theta(\theta - \theta_0)^2 / 2$$



Bead model of a  $\beta$ -hairpin protein. Monomer sequence:  $\text{H}_3\text{NH}_3\text{N}_2\text{H}_3\text{NH}_3$ . Parameters:  $e_h=2 \cdot 10^{-3}$ [a.u.],  $\sigma=7.2$ [a.u.],  $A=0$ ,  $B=1 \cdot 10^{-3}$ [a.u] for quartets with at least 2 neutral monomers and  $A=B=3 \cdot 10^{-3}$ [a.u] for all the rest quartets,  $k_\theta=4 \cdot 10^{-2}$ [a.u./rad<sup>2</sup>]. Total number of monomers: 16

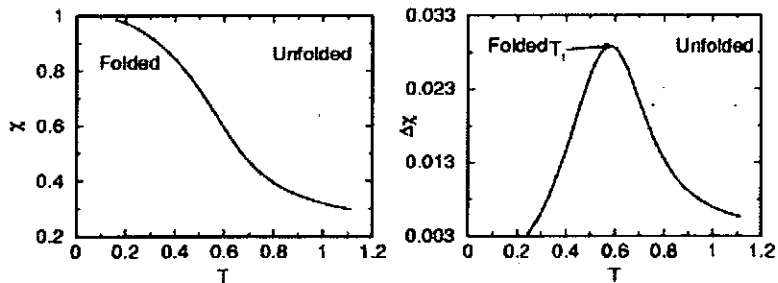
## COLLAPSE TRANSITION



Most proteins contain amino acid residues with hydrophobic side-chains. Upon placing into a polar medium such as water the hydrophobic species tend to cluster together. This leads to a dramatic reduction in the protein size or so-called *hydro-phobic collapse*. The collapse transition can be identified from potential energy/ specific heat plots as the point where Cv has a maximum.

Potential energy rapidly drops when the temperature is decreased, that is folding conditions are imposed.

## FOLDING TRANSITION

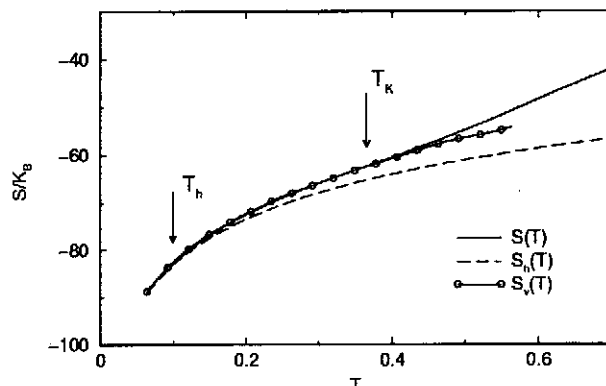


In the collapsed state proteins rearrange their residues so as to match the native state conformation. To monitor this process a quantity designed to distinguish the native state from other conformations (*order parameter*) is introduced:

$$\chi = \frac{2}{(N-1)(N-2)} \sum_{i=1}^{N-2} \sum_{j=i+2}^N \Theta(\epsilon - |r_{ij} - r_{ij}^{GS}|), \quad \Delta\chi = \langle \chi^2 \rangle - \langle \chi \rangle^2$$

At  $T < T_f$  conformations with high degree of similarity to the native state have predominant statistical weight [Baumketner & Hiwatari, submitted to JPSJ].

## GLASS TRANSITION



The point at which the total and vibrational entropies match determine the glass transition temperature  $T_K$  [Baumketner & Hiwatari, to be published]

## CONCLUSIONS

- In this presentation we made a short excursion into what constitutes the protein folding problem.
- We briefly outlined the main approaches to the problem which could be of interest to the computational scientist.
- A few examples of lattice and off-lattice minimalist models have been given, including some of the most popular potential energy functions.
- More detailed discussion concerned an off-lattice protein model designed to fold into a  $\beta$ -sheet conformation. We showed that this simple model possesses all common characteristics shared by real proteins. Upon decrease of temperature the model collapses into a globule. Further cooling leads to a transition into the folded state. At still lower temperatures the protein undergoes a glass transition.
- On the kinetical side, it was shown that for the studied model the complex folding reaction can be successfully modeled by simple diffusion-equation formalism.



## 生体分子の分子動力学シミュレーション：古典から量子へ

産業技術総合研究所 古明地勇人

生体分子の分子シミュレーションには、主に、古典力場に基づく分子動力学法(MD)が用いられている。この古典 MD 法は、生体分子の解析ツールとして広く成功を収めている。しかし、古典 MD では、電荷分極や電子移動など、量子効果が本質的な現象は、原理的に解析することができない。量子力学に基づくなんらかのシミュレーション法が必要となる。

今回、そのような量子力学に基づく MD 法の一つとして、*ab initio* FMO-MD 法 (*ab initio* Fragment Molecular Orbital method based Molecular Dynamics, [1]) という MD 法を開発したので、報告する。この方法では、フラグメント分子軌道法 (*ab initio* Fragment Molecular Orbital method, FMO) で電子状態を決めながら、分子動力学シミュレーション (Molecular Dynamics, MD) を行う。生体分子のような巨大分子にも適用可能である。

FMO 法は、非経験的分子軌道法の高速近似法である[2-5]。分子をフラグメントに分割して分子軌道計算を行うことで、巨大分子系の電子状態やエネルギーを、高速に計算することができる。全フラグメントの計算が終わった時点でフラグメント対に対しても分子軌道計算することと、それぞれのフラグメントとフラグメント対の計算をする際に周囲からの影響を取り込むことで、近似の精度を上げている[2, 3]。計算速度は、フラグメント数を  $N$  とすると  $O(N^2)$  である。並列化計算に向いており[6]、現時点で、250 残基のタンパク質の一点計算を 4 時間程度で行うことに成功している (Fukuzawa et al., in preparation)。

FMO-MD 法では、分子系について、原子核に掛かる力 (電子エネルギーの勾配、[4]) を FMO 法で計算し、その力を用いて、それぞれの原子核を通常の MD 法で動かす。この過程を繰り返すことで、分子系の時間発展を、電子状態を考慮しながらシミュレーションすることができる。FMO-MD 法は、FMO 用ソフト ABINIT-MP [3] と、生体分子 MD 用ソフト PEACH [7, 8] を組み合わせることで実装した (図 1)。まず、ABINIT-MP とインターフェースサブルーチン (FMOini、FMOfor) をまとめて、プログラムライブラリー化した (ABINIT-MP LIB)。PEACH からは、FMOini を呼んで FMO の初期化を行い、FMOfor を呼んで力の計算を行う。

実装した FMO-MD 法を用いて、グリシン五量体 (図 2A) について MD (図 2B) およびエネルギー極小化計算を行った。定エネルギー MD、定温 MD、結合長束縛法、最急降下法、共役勾配法、などを試験した。その結果、FMO-MD 法でも、古典 MD 法と同様に、これらのアルゴリズムが安定に実行できることを確認した[1]。

今後は、QM/MM 法の導入などをつつ、実際のタンパク質や核酸の量子 MD 計算を展開していく予定である。

付記： FMO 用ソフト ABINIT-MP は下記ページより入手できる。

<http://molddb.nihs.go.jp/abinitmp/>

また、生体分子シミュレーションソフト PEACH は、下記ページより入手できる。ただし、現時点のバージョン(3.8)では、FMO-MD は未導入。

<http://staff.aist.go.jp/y-komeiji/>

- [1] Y. Komeiji, T. Nakano, K. Fukuzawa, Y. Inadomi, Y. Ueno, T. Nemoto, M. Uebayasi, D. G. Fedorov, K. Kitaura, (2002) submitted.
- [2] K. Kitaura, E. Ikeo, T. Asada, T. Nakano, M. Uebayasi, Chem. Phys. Lett. 313 (1999) 701.
- [3] T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, Y. Akiyama, M. Uebayasi, K. Kitaura, Chem. Phys. Lett. 318 (2000) 614.
- [4] K. Kitaura, S. Sugiki, T. Nakano, Y. Komeiji, M. Uebayasi, Chem. Phys. Lett. 336 (2001) 163.
- [5] T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, K. Fukuzawa, Y. Akiyama, M. Uebayasi, K. Kitaura, Chem. Phys. Lett. 351 (2002) 475.
- [6] T. Sato, Y. Akiyama, T. Nakano, M. Uebayasi, K. Kitaura, IPSJ Transactions on High Performance Computing Systems, 41 (2000) No. SIG5, 104.
- [7] Y. Komeiji, M. Uebayasi, R. Takata, A. Shimizu, K. Itsukashi, M. Taiji, J. Comp. Chem. 18 (1997) 1546.
- [8] Y. Komeiji, M. Haraguchi, U. Nagashima, Parallel Computing 27 (2001) 977.

図 1 FMO-MD 法の実装

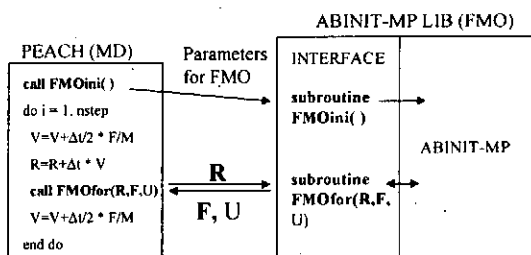
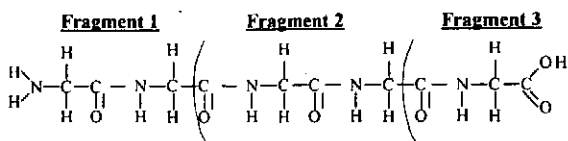


図 2 グリシン五量体の FMO-MD シミュレーション

(A) ペプチドの分割



(B) トラジェクトリーの重ね合わせ



(300 K 温度束縛法、 0.5 fs x 2000 steps、計 1 ps.)

# ナノシミュレーション技術の研究開発と有機分子集合体への応用

## — 分子コンピュータを目指して —

三上益弘

産業技術総合研究所 計算科学研究部門

*mikami.masuhiro@aist.go.jp*

### 1. はじめに

ナノサイエンス・ナノテクノロジーは、情報・バイオ・環境の分野において革新的な進歩をもたらし、21世紀産業の基幹技術となると大いに期待されている。例えば、情報通信では、コンピュータのさらなる発展を目指して、ナノスケールでの構造体の創製・制御が必要になってきた。現在、挑戦されているシリコンを使ったゲート長100nm以下の素子、さらに5年後に実用化を目指している20~50nmの素子を実現するためには、これまでの技術の改良だけでは対応しきれずに、新たな技術の開発が必要であると言われている。例えば、20nmサイズのシリコン結晶と絶縁体の界面にかかる応力を測定し、応力誘起の破壊現象を実験的に調べることは、仮に可能であったとしても大変な困難が伴うと予想される。また、シリコン素子の微細化の限界も指摘されるようになり、シリコンに代わる単分子素子の探索が行われるようになってきた。その結果、例えば、ナノチューブを用いた接合型電界効果トランジスタやベンゼンチオール分子集合体によるダイオード素子が実現されている。分子を使えば、原理的には、ゲート長が1~2nmのトランジスタを実現することが可能であり、シリコン素子の限界を大きく超えた集積度を実現できる可能性がある。しかしながら、現在の所、これらの分子をどのように結合して三次元分子回路を実現し、演算装置を組み立てるのかについては、未解決の課題である。そこで注目されているのが、分子の自己集合化機能である。自己集合化とは、分子間相互作用に内在する設計図に従い自由エネルギーを最小にするように分子同士が自発的に構造を形成することである。例えば、従来の線状高分子を超える三次元的な新構造高分子は、水素結合の組み合わせにより、シート状・棒状など変化に富んだ構造を形成する。分子間に内在する設計図が解明され、その設計図に従ってある物質環境下で高次超構造を構築する方法が確立されれば、自由にさまざまな構造を構築できるようになり、分子エレクトロニクスも夢ではなくなるであろう。今や、物質の研究開発は、単に素材になる物質を合成してれば良い時代ではなくなってきた。機能性物質を開発すると同時にそれをナノスケールで、分子コンピュータなどの製品システムに組み立てることも重要な研究テーマになってきた。

実験と計算科学は、相補的關係にある。実験的に作られた物質は、偶然に合成されたものであっても、本物であり、測定された構造・物性は、その測定方法に原理的な誤りがなければ、誤差はあるが、その物質の真実の値である。一方、計算から得られた物質は、量子力学・統計力学に基づいて仮想的に作られたものである。しかしながら、計算の強みは、ナノスケールでのその物質についての詳細で膨大なデータを提供できるところであり、例えば、各時間の原子の運動や実験的に得ることが難しい分子間相互作用の詳細までも分かる。また、そのデータを用いてさまざまな物性を同時に求めることができる。このように両極端にある両者が深く結びつき、協力関係を強固にした時にナノスケールでの物質の研究・開発は大いに促進されると期待され、これまで以上に計算科学が注目されている。

さて、前書きが長くなったが、本稿では、こうした状況にあるナノサイエンス・ナノテクノロジーの研究開発を加速化し、産業化を促進する上で、不可欠な計算科学をベースにしたナノシミュレーション技術の研究開発とその適用について述べる。具体的には、最初に、ナノシミュレーションシステム概念を提示し、その実現のために、産業技術総合研究所・計算科学研究部門で研究開発してきた要素技術(オーダN法、高精度密度汎関数法、高速拡張アンサンブル法、粗視化法など)について述べる。また、それらの要素技術を用いた応用研究(単分子層薄膜の構造、脂質分子膜の分子透過機能、核酸分子の自己組織化過程など)について紹介する。

## 2. ナノ機能材料設計のためのシミュレーションシステム

ナノ機能材料設計の概念図を図1に示した。ナノテクノロジーの最大の特徴は、ナノ機能材料のナノ部品の研究開発とそれを集積化した製品システムの開発が一体に進められることにある。そのため、ナノ機能材料のナノ部品設計・合成設計・集積化設計・機能設計までを包括的に行えるナノ機能材料設計システムが、ナノテクノロジーの研究開発を加速化し、産業化を促進する上で、不可欠である。

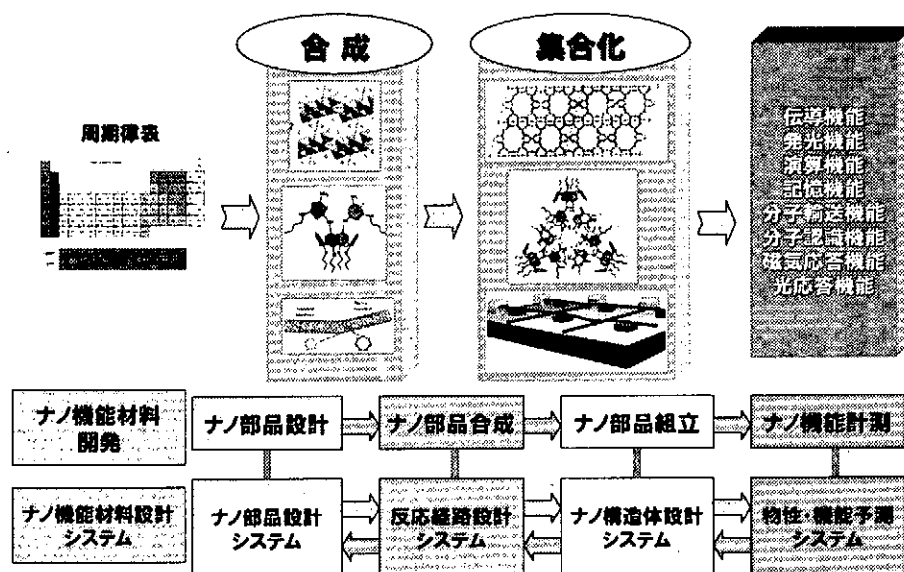


図1. ナノ機能材料設計の概念図

我々は、この設計を支えるナノシミュレーションシステムとして図2に示すナノ機能材料設計システムの開発を計画している。

・ナノ部品設計システムは、ナノ構造体を構築する上で必要なサイズ・形状を持つナノ部品をデータベースの中から絞り込み、有力な候補を選択するシステムである。さらに、有力候補のナノ部品間に作用する相互作用エネルギーを計算エンジン(非経験的分子軌道法エンジン・密度汎関数法エンジン・ナノ構造探索エンジン)を用いて計算し、その構造安定性を検証する。

・反応経路設計システムは、提案されたナノ部品の合成経路を軌道エネルギー(HOMO、LUMO)、電荷、双極子モーメント、四重極子モーメント、ハードネス、電子親和性などから推定し、有力な反応経路を選択するシステムである。選択された反応経路は、計算エンジン(非経験的分子軌道法エンジン・密度汎関数法エンジン・ナノ構造探索エンジン)により詳細に調べ、最適反応経路が提案される。

・ナノ構造体設計システムは、提案されたナノ部品から構築されるナノ構造体を、その相互作用エネルギーから推定し、組み立てるシステムである。提案されたナノ構造体は、計算エンジン(ナノ構造探索エンジン・ポテンシャル関数計算エンジン・平均力エネルギー計算エンジン)より、詳細にその構造安定性と相状態が調べられ、最適構造が提案される。

・物性機能予測システムは、提案されたナノ構造体の物性(電気伝導度、弾性定数、光物性など)を計算エンジン(非経験的分子軌道法エンジン・密度汎関数法エンジン・ポテンシャル関数計算エンジン・平均力エネルギー計算エンジン・ナノ構造探索エンジン)を用いて計算し、予測するシステムである。

・ナノ機能材料データベースシステムは、設計システムと計算エンジンを用いて予測されたナノ部品の構造と合成経路、ナノ構造体の構造と物性機能を蓄積する知識データベースである。このデータベースシステムにより、構造と機能の知識データベースの拡充がはかれると同時に、合成経路と分子物性の相関やナノ構造体と分子間相互作用の相関、さらにナノ構造体と物性機能の相関に関する理論(規則)の確立を促進することができる。これらの理論(規則)の確立は、ナノ機能材料設計を迅速化する上で強力なツールとなる。

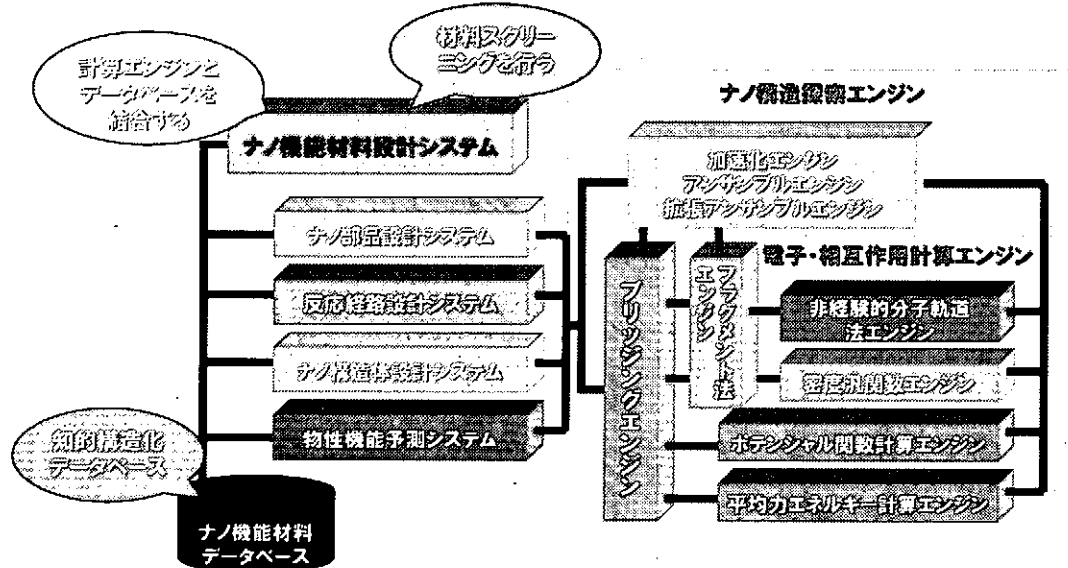


図 2. ナノ機能材料設計システム

さて、このシステムを実現するためには、1 ナノメートルから 100 ナノメートルのサイズのナノ構造体を扱うことができる精密かつ高速な電子状態計算手法と分子シミュレーション手法、及びそれらを融合するためのブリッジシミュレーション技術が必要である。そこで、我々は、その要素技術の開発に取り組んでいる。

### 3. ナノシミュレーション技術の研究開発

#### 3.1 高速電子状態計算手法の研究開発

密度汎関数法による大規模電子状態計算手法は単一の計算技術ではなく複数の計算技術の複合体として実現されるものである。それゆえナノスケールに適用可能な電子状態計算手法の開発は實際上、極めて困難な課題である。世界的に見ても多くの様々な研究が進行中であるが、数値

的に安定で汎用的に適用できる大規模電子状態計算コードは存在しない。我々はこれまで局在非直交基底を仮定し、そこで発生する固有値問題をオーダー(N)の計算量で解くことの出来る第一原理リカーゾン法と名付けた新しい計算手法を開発した[1]。本手法の特徴は分子、絶縁体、半導体、金属に渡る広範囲な系に適用できる点にあり、現時点では金属系に適用できる唯一のオーダー(N)法であると言える。さらに、高速化を実現するために新しい数値積分法と基底関数の作成方法、行列要素の算出方法を開発した。

### (1) 密度汎関数計算における高速・高精度積分法の開発

数値局在基底を用いた密度汎関数計算において計算の律速段階は行列要素の数値積分であり、200原子の系において全計算時間のおよそ80%を占めている。そこで、高速・高精度積分法を開発するために数値積分法としてファジーセル空間分割法、実空間メッシュ法の二つの手法を比較検討した。その結果、実空間メッシュ法がファジーセル空間分割法に比べおよそ2~3倍程度の効率を持っていることが分かった。また実空間メッシュ法は空間的にメッシュが一様に張られていることから、構造最適化や分子動力学計算において安定に動作することが分かった。

### (2) 数値局在基底の環境依存型最適化法の開発

十分な精度を持って1電子波動関数を記述するために、通常は1原子の価電子当たり、20~30程度の原子基底が必要である。しかしながら、大規模な系を計算する場合、計算時間との兼ね合いから現時点ではレベルの低い基底関数を使用せざるを得ない。この現状を乗り越えるために基底関数の動径波動関数を環境依存で最適化する新しい計算手法を開発した。本手法において動径波動関数はプリミティブ基底の線形結合として表現され、その展開係数が変分原理に基づき最適化される。ここで我々はプリミティブ基底として閉じ込めポテンシャルを持った原子の擬ポテンシャルに対する固有状態を用いた。本手法の最初の適用例として我々はアミノ酸の一つであるグリシンの構造最適化を行った。その結果、例え最小基底でさえも、実験値を良く再現し、高レベル基底と比肩しうる基底関数が作成できることが分かった。環境依存で基底関数を最適化するのに要する時間は構造最適化の全計算時間と比較し、数%程度であり、計算時間の著しい減少も実現できることも分かった。

## 3.2 分子シミュレーション技術の開発

ナノ構造体の自己組織化現象解明のために新しい分子シミュレーション技術を開発した。

### (1) 2次元周期境界条件を持つ静電相互作用の高速計算方法 [2]

分子デバイス開発において重要な分子薄膜や生体膜など大規模な二次元周期境界を持つ系の静電相互作用の高速精密計算手法を開発した。従来の方法と同じ計算精度を保ち、数百倍の高速化を実現しており、論文発表した。圧力一定のアンサンブルにも適用できるように、応力テンソルの計算手法を定式化した。さらに、これらの方法をさらに高速化するために高速フーリエ変換を用いた新しいアルゴリズムの開発とその並列化を実現し、従来の方法に比べて1000倍程度高速な計算手法を確立した。

### (2) 高速数値積分法の開発 [3]

分子系の自己誘導力分子動力学法への拡張に有利な剛体モデルを用いた等温等圧アンサンブルにおける時間に可逆な運動方程式のアルゴリズムを開発した。この手法は、従来広く用いられてきたシェーク法のような拘束分子動力学法に比べて、優れた計算効率を持つことを示した。この計算効率の優位性は、複雑系の計算で大変有用な多重時間積分を用いた際により高くなり、さら

に並列計算環境ではその効率が格段に優位になることを示した。さらに、従来の手法で計算される系の構造や動的な性質を高い精度で再現するアルゴリズムであることも分かり、精度を落とさず効率の高い分子動力学シミュレーションが可能になった。さらに、これまで開発してきた自己誘導力法(SGMD)とハイブリッドモンテカルロ法(HMC)と結合し、さらに高効率で系の熱力学状態が統計力学的に正しく記述できる手法の開発に成功すれば、ナノサイズの分子自己集合構造の予測が可能になるものと期待される。

### (3) 粗視化法による分子間相互作用の導出 [4]

ミセル、コロイド、ベシクルなどの高次構造を持つ系を研究するために、新しい粗視化法(可逆階層的粗視化法)とそのポテンシャル関数を開発した。本粗視化法は、単一原子の運動の時間平均化、原子集団の統計平均化、分子を構成する原子団の統計平均化の三種類の粗視化法からなり、二酸化炭素、水などの溶媒と界面活性剤や高分子などの溶質を同一の基準で粗視化できる。この粗視化法と分散粒子動力学法(DPD)と組合わせて、気液界面におけるミセル形成、二酸化炭素超臨界流体中におけるミセル形成、高分子混合系のナノ組織形成などに適用し、実験結果を再現できることがわかった。

## 4. ナノシミュレーションによる適用研究

三次元分子回路や分子コンピュータを組み立てる有力な手段であると考えられている分子自己集合化機能を解明すめために、ナノシミュレーション技術を用いた適用研究をおこなっている。

### (1) アルカンチオール単分子膜の自己組織化構造 [5]

第一原理分子動力学法 (STATE コード) を用いて金-アルカンチオール系自己組織化膜の安定構造に関する研究を行い、金と硫黄原子との相互作用および構造を明らかにした。また、チオールの吸着により金表面上の欠陥が安定化されることを初めて見出した。さらに、自己組織化・界面科学のモデル系として、また分子デバイスのモデル系として注目されている金表面に吸着させたアルカンチオール分子膜の構造を、上記第一原理分子動力学計算で求めた金-アルカンチオールポテンシャルなどを用いて古典分子動力学シミュレーションで調べた。その結果、ごく最近の STM 実験の結果を良く再現し、STM 実験では分からなかった多様な分子膜構造と分子間相互作用の関係を明らかにすることができた。

### (2) 高精度分子軌道計算手法の開発と有機分子の分子間相互作用の研究 [6]

分子間相互作用を高精度で計算する手法の確立を目指し、基底関数の選択や電子相関の補正法が分子間相互作用の計算に与える影響について解析を行っている。その一例として、フッ素化合物の分子間相互作用の精密計算用の基底関数を使い、フッ素化したエーテルと炭化水素の相互作用等を計算し、フッ素化が相互作用の大きさや相互作用の方向依存性に与える影響について解析した。その結果、フッ素化によって相互作用の大きさや方向依存性が大きく変わることが分かった。また、 $\text{CH}/\pi$ 、 $\text{CH}/\text{O}$  等の弱い分子間相互作用の作用機構や、これらの弱い相互作用が大環状化合物の立体構造に与える影響について解析を行い、置換基が  $\text{CH}/\pi$  相互作用の大きさに極めて大きな影響を与えることや、弱い相互作用が大環状化合物の安定構造に大きな影響を与えることが分かった。

### (3) 銅基板上の塩基分子(アデニン)の自己集合化構造の研究 [7]

銅基板上的アデニン分子は、二重鎖構造や六方構造など複数の自己集合化構造が存在することが STM により観察されている。本研究では、二量体間に存在する複数の水素結合パターンに注目

し、二量体間の分子間相互作用を高精度非経験的分子軌道法により、また、アデニン分子と銅基板間の吸着エネルギーを高精度密度汎関数法から求め、原子間ポテンシャル関数を構築し、それを用いた分子動力学シミュレーションを行い、アデニン分子の自己集合化構造の形成についての知見を得た。その結果、アデニン分子が直線状に並んだ一重鎖よりも一重鎖が二本平行に並んだ二重鎖構造の方がより安定で、さらに、二重鎖が集合してできた六方構造が最安定であることがわかった。

#### (4) 脂質二重層膜の安定性・低分子透過性 [8]

分岐のある疎水性鎖を持つ脂質分子は一般に安定性が高く、イオンなどの透過性が低い二重層膜を形成することが知られている。この特性を利用した合成糖脂質膜にはバイオテクノロジー分野における機能性材料としての有用性が期待されており、分岐のあるフィタニル鎖を採用した合成糖脂質は実際に低いプロトン透過性を示すことが実験的に確認されている。しかしながら、疎水性鎖の分岐が膜の性質に与える影響について、分子レベルでの理解はほとんど進んでいない。

そこで本研究では、疎水性鎖が直鎖であるジパルミトイルホスファチジルコリン(DPPC)とメチル分岐を持つジフィタニルホスファチジルコリン(DPhPC)の二重層膜について、それぞれ等温等圧(NPT)アンサンブルで分子動力学(MD)シミュレーションを行い、その構造や運動の比較から、脂質分子のメチル分岐による膜安定性に与える影響を調べた。その結果、脂質分子の疎水性鎖の配向分布は、DPPC, DPhPCともに膜垂直方向にのびた構造が最も多く見られたが、その分布はDPhPCの方が広く、さらにDPhPCの同一分子内にある2本の疎水性鎖は互いに平行な配向を取りにくくなっていることがわかった。また、脂質の疎水性鎖中のゴーシュ・トランス異性化速度を、定義した状態関数の緩和時間から求めた。分岐のあるDPhPCは直鎖のDPPCに比べ異性化速度が全体に下がっており、疎水性鎖の中央部付近で約5倍程度の遅い緩和を示している。また、異性化速度がメチル分岐の位置で特徴的に遅くなっていることが分かった。脂質分子の膜面内での配列オーダーを評価するため、脂質分子の重心に対する2次元ボロノイ解析を行った。その結果、DPhPCの方が膜面内で比較的オーダーの高い配列を取ることがわかった。以上の解析結果から、分岐を持つ疎水性鎖の局所的な配向秩序は低いものの、分岐鎖を持つDPhPC分子は膜面内で分子間配列秩序が高く、その運動性は直鎖のDPPCに比べてかなり低いことがわかった。分岐鎖のある脂質二重層膜の安定性は、この疎水鎖の低い運動性と脂質分子の秩序の高いパッキングによってもたらされることを解明した。

#### 参考文献

- 1) T. Ozaki and K. Terakura, *Rhys. Rev. B.* **64**, 195126 (2001); T. Ozaki, *ibid.* submitted.
- 2) M. Kawata, M. Mikami and U. Nagashima, *J. Chem. Phys.* **116**, 3430(2002).
- 3) W. Shinoda and M. Mikami, *J. Comp. Chem.* in press.
- 4) C. C. Liew and M. Mikami, *Chem. Phys. Lett.* **368**, 346(2003).
- 5) Y. Morikawa, T. Hayashi, C. C. Liew, and H. Nozoye, *Surface Science*, **507**, 46(2002).
- 6) S. Tsuzuki, T. Uchimaru, M. Mikami, and S. Urata, *J. Chem. Phys.* **116**, 3309(2002).
- 7) K. Shinoda, W. Shinoda, C. C. Liew, S. Tsuzuki, Y. Morikawa, and M. Mikami, in preparation.
- 8) W. Shinoda, M. Mikami, T. Baba, and M. Hato, in preparation.



# 多階層的モデリングとシミュレーションプラットフォーム

名古屋大学大学院 土井正男

## 1. はじめに

多階層的モデリングとは、巨大で複雑な系のシミュレーションを行うときに、いくつかの階層ごとのシミュレータを連携させて系全体の振る舞いをシミュレートしようとする方法である。計算科学が直面している多くの問題は、一つのシミュレータでシミュレーションすることが不可能になっており、多階層的モデリングのアプローチが必要になっている。

多階層的モデリングは言うに易く、行うに難い典型的な問題である。概念的に分かりやすくとも、その実現は容易ではない。私たちは、ソフトマテリアルのシミュレーションシステム OCTA を作る過程でこの問題に突き当たり、苦しんできた。ここでは、私たちの経験を話したいと思う。

OCTA は NEDO のプロジェクトとして、11 の企業とともに名古屋大学の中で開発されたソフトマテリアルのための統合的シミュレータである。ソフトマテリアルは生体の構成要素であり、また、マイクロ・ナノの世界のプロセッシング技術においても重要な役割を果たす。ソフトマテリアルの特徴は原子・分子のスケールに比べてはるかに大きい、nm から  $\mu\text{m}$  のいわゆるメソスケールの領域の特徴的な長さを持ち、 $10^{-9}\text{s}$  から  $10^3\text{s}$  の非常に広い時間範囲が関与する点である。ソフトマテリアルの物理の中ではこのような現象を扱うためにさまざまな理論的な方法が考案されてきた。私たちの目的はそれらを多くの人が使えるようにソフトウェアの形にまとめることであった。

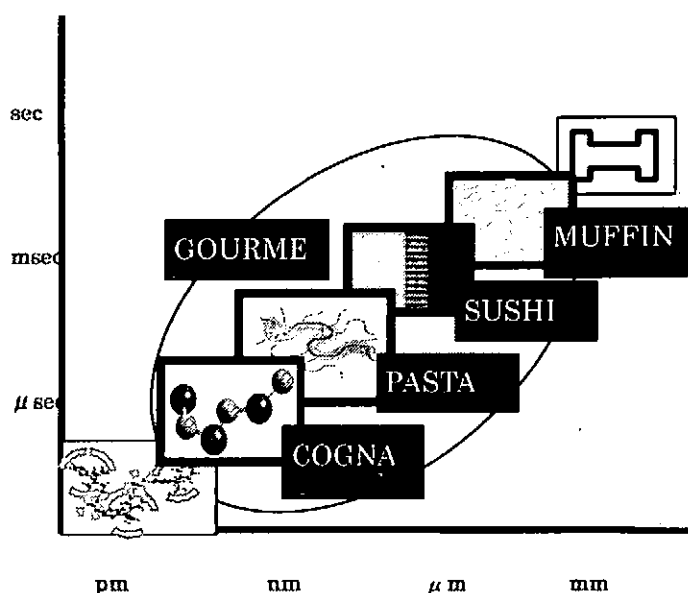
種々の理論モデルをソフトウェアにすることは、(人に使ってもらおうソフトを作ると言うたいへんさはあるが)これまでの科学の歴史の中で多くの経験があることである。Gaussian などのソフトウェアは大学から生まれ、理論化学の成果をソフトウェアにするという努力の結果、広く使われるようになったものである。ソフトマテリアルのシミュレータの設計の難しさは、多階層的モデリングの難しさである。ソフトマテリアルにおいて重要となる時間空間のスケールは非常に広範であり、一つの理論モデルだけで扱うことができない。プロジェクトでは私たちが直面した困難は、スケールの異なる問題の絡んだ複雑な現象を扱う計算機シミュレーションであつかう方法の開発である。

## 2. シミュレーションエンジン

私たちは、高分子のメソスケールの現象をあつかうモデルとして、四つを選びプログラム開発を行った。選んだものは、最先端の理論に基づくものというより、どちらかという、学問的に確立しているが、汎用のシミュレーションプログラムとしては提供されていなかったものである。

(1)粗視化分子動力学エンジン  
COGNAC

COGNAC は分子動力学法の計



算を行なうプログラムである。ユーザが設定した任意の分子模型に対して、流動、変形、電場、化学反応などの現象をシミュレーションできる。他のメソスケールシミュレータと組み合わせて、界面近傍の高分子のシミュレーションができる点に特徴がある。

#### (2)レオロジー特性予測エンジン PASTA

PASTA はレプテーション模型に基づいて、分子量分布のある高分子の粘弾性を予測するプログラムである。非線型粘度、伸張粘度、分子拡散などが計算できる。

#### (3)界面エンジン SUSHI

SUSHI は、高分子を含む界面にたいして、平均場近似に基づいて高分子の形態やセグメント分布を計算するプログラムである。ブロック高分子のつくるマイクロ相分離構造、高分子界面活性剤の自己組織化、ミセル化、界面への高分子の吸着平衡等の研究に応用することができる。

#### (4)多相系エンジン MUFFIN

MUFFIN は、多相の連続体にたいして、流動、変形、拡散・輸送などの現象をシミュレーションするプログラムである。MUFFIN は実際には `Elastica`, `ElaDyna`, `GelDyna`, `Electrolyte`, `MEMFluid`, `PhaseSeparation` という6つのパッケージからなり、多相材料の弾性変形、ゴムやゲルの変形、電気化学系、マイクロ流動、相分離などの現象を扱う事ができる。

### 3. シミュレーションプラットフォーム

さまざまなシミュレーションプログラムを統合化するために、私たちはUDF(User Definable Format)というデータ形式を考案し、それを扱うためのプログラム GOURMET を開発した。UDF は、科学技術計算で扱うデータの汎用表現を目的に設計されており、すべての数値データに対して、名前と単位を与える事ができる。UDF の一例を示す。

```
//datafile spring.udf
¥begin{def}
  spring_system: {
    spring_const      : float [kg/s^2]
    spring_internal_friction : float [kg/s]
    mass : float [kg] "mass of the weight" }
¥end{def}
¥begin{data}
  spring_system:{0.05, 0.0001, 0.01}
¥end{data}
```

ここで、`¥begin{def}`と`¥end{def}`の間に囲まれた部分がデータの定義部である。この例では`spring_system`というデータには、`spring_const`,`spring_internal_friction`, `mass`という名前の`float`型のデータがあり、それぞれの単位が`[kg/s^2]`,`[kg/s]`,`[kg]`である事を宣言している。そして`¥begin{data}`と`¥end{data}`に囲まれた部分にデータが書かれる。

UDF で書かれたデータは、すべてのデータ(数字や文字列)に名前付けが可能であり、プログラムからは、名前を呼ぶ事によってそのデータを読み書きできる。UDF ファイルは簡易的なデータベースファイルとみることできる。

次の例は、少し複雑なUDFの例である。

```

// data file atom.udf
¥begin{unit}
  [L]=1[nm], [T]=1[fs], [M]=1.66E-27[kg]
¥end{unit}
¥begin{def}
  class vector:{ x:float [unit], y:float[unit], z:float[unit]} [unit]
  class Atom:{ position:vector [L], velocity:vector [L/T], type:<AtomType, KEY>}
  atom[ ]:Atom
¥end{def}
¥begin{data}
atom[ ]:{{ {1.1 1.3 0.2} {1.0, -2.0, 3.0} "Ar"}
          {{0.1 0.3 1.2} {-1.0, 0.0, 4.0} "Ne"}]
¥end{data}

```

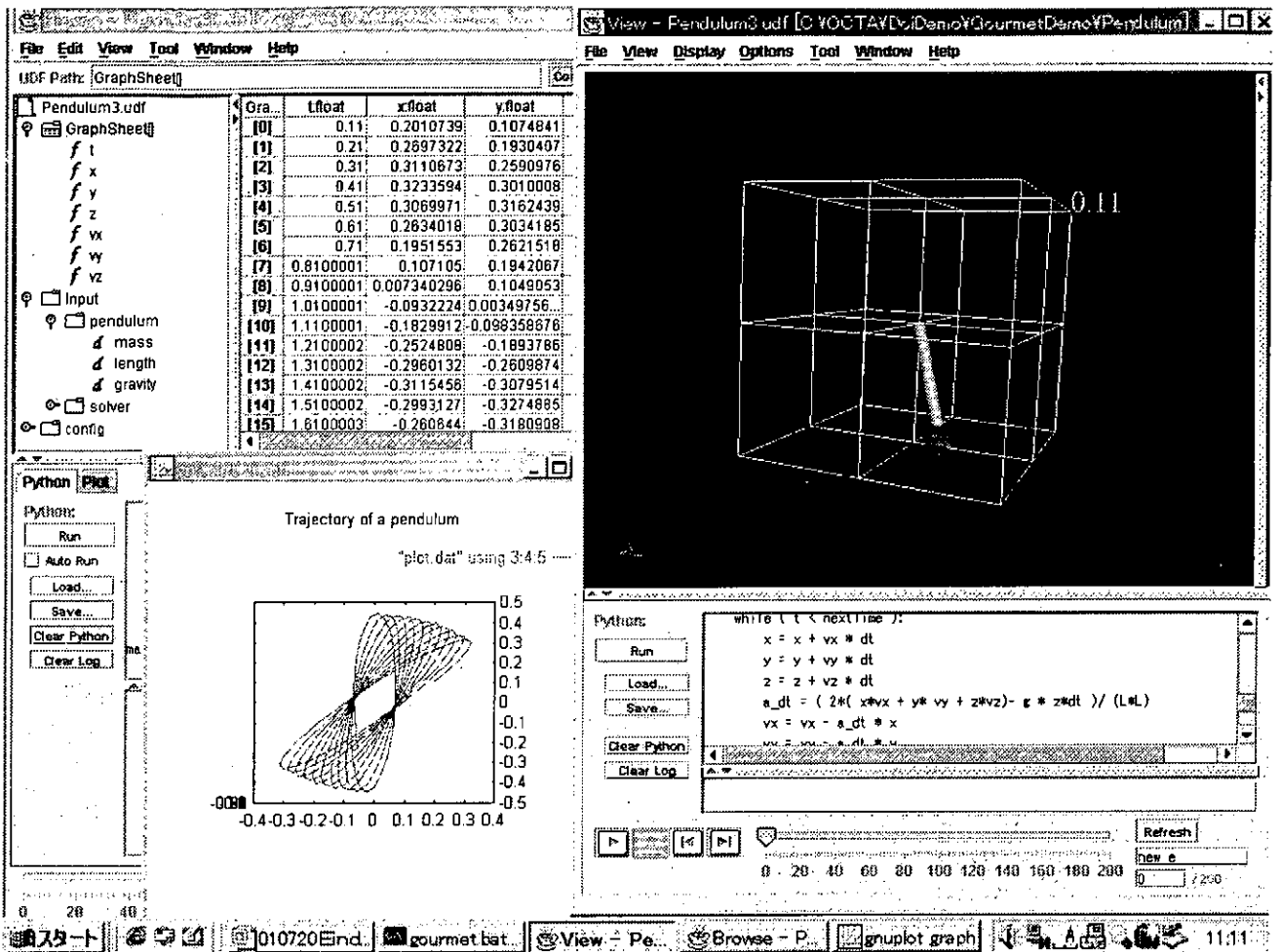
この例は、ユーザが独自の単位を定義したり、class というキーワードを用いて新しいデータ型を定義することができる事を示している。また、UDF にはポインタであらわされる参照関係を表現するために、KEY, ID というデータ型も用意されている。

このような UDF ファイルに対して様々なサービスを提供するものとして GOURMET が開発された。GOURMET はいろいろなシミュレーションプログラムに共通のインタフェースを与えるものである。GOURMET は UDF ファイルに対して、図 2 にしめすように、データの構造を表示し、データ入力、編集、データの抽出、解析、グラフ化、3次元表示などを行なうことができる。どのような言語で書かれたプログラムであっても、データの入出力を UDF の形式で書けば GOURMET の環境を利用する事ができる。Python というプログラム言語を搭載しており、簡単なシミュレーションプログラムはそれだけを用いて作る事ができる。

私たちはこのような制約の少ない枠組みのなかで、多階層的モデリングに迫ろうとした。多階層的なモデリングに対するアプローチは一つではないであろうし、ある方法やデータ形式を強制することはできないであろうという考えに基づいている。GOURMET は OCTA システムのシミュレーションエンジンのインタフェースであるだけでなく、どのようなシミュレーションプログラムをも受け入れることができる。様々なシミュレーションプログラムが共通のテーブルに載ったときにはじめて、多階層的なモデリングが実現できるものだろうというのが私たちの考えである。

#### 4. おわりに

プロジェクトで作られたプログラム、ソースコードおよびマニュアルはすべ <http://octa.jp> に公開されている。OCTA はソフトマテリアルを扱うための統合化シミュレータであるが、閉じたものではない。OCTA の設計においては、多くの人の手によってその後も発展して行くようなシステムを作ることを目標とした。実際、OCTA には様々な拡張が可能である。OCTA が提供しているものはシミュレーションプラットフォームと言う大きなテーブルと、その上に載ったいくつかの単品の料理（エンジン）だけである。単品でも食事はできるが、手を加えてアレンジすればおいしいコース料理になる。新しい素材を使って新しい料理を付け加えることも可能である。アレンジの仕方によって、高校生向・大学生むけの教育目的の利用にも、プロフェッショナル向けのシリアスな利用にも役立つようにすることができる。このシステムが皆さんのお役に立てば幸いである。



### 参考文献

- [1] <http://octa.jp> : OCTA の公式ホームページである。
- [2] OCTA マニュアル, "ソフトマテリアルのための統合化シミュレータ", "Integrated simulation system for soft materials" いずれも上記 URL よりダウンロード可能
- [3] Material Modeling Platform, Masao Doi, proceeding of the 15<sup>th</sup> Toyota Symposium for Scientific and Engineering Computations for the 21<sup>st</sup> Century, Elsevier, to be published
- [4] 多階層のモデリング 土井正男、パリティ 17 56-60 (2002)

# 乱流の Ultra Simulation

石原卓, 金田行雄 (名古屋大学大学院工学研究科)

横川三津夫 (産業技術総合研究所 グリッド研究センター)

板倉憲一, 宇野篤也 (地球シミュレーションセンター)

## 1 はじめに

乱流の直接数値シミュレーション (DNS) は, 乱流実験における測定誤差やデータの不確定性等の問題とは無縁の正確で詳細な乱流の基礎データを提供する. ただし, 乱流中の微細な渦構造にいたる小スケールまで正しくシミュレートすることを目的とした DNS において高レイノルズ数  $Re$  の乱流を実現することは非常に困難である. それは乱流を記述するのに必要な自由度数, もしくは格子点数が  $Re^{9/4}$  に比例して大きくなり, 有限な自由度数しか扱えない計算機の限界に容易に到達してしてしまうからである.

一方, 近年のスーパーコンピュータの目覚ましい発達により, 有限自由度と言えども数年前とはけた違いに巨大な自由度を高速に扱うことが可能となってきた. 特に 2002 年の 3 月に開発を終えた地球シミュレータ (ES) はピーク演算速度 40TFlops・メモリ総量 10TB を有する世界最高速度・記憶容量のスーパーコンピュータとして注目されている. 我々は地球シミュレータのハードウェア (ベクトルプロセッサ, 単段高速クロスバススイッチ等) の有効な性能評価を行うこと, 及び超高速かつ超大規模な乱流の DNS を実現することを目指し, 地球シミュレータ用に最適化した 3 次元実高速フーリエ変換 (3DRFFT) を開発した. その結果, 512 ノードを用いた, 格子点数  $2048^3$  の DNS において, 16.4TFlops の超高速計算と従来の DNS (格子点数  $1024^3$ ) と比べた違いに大規模な Ultra DNS (格子点数  $4096^3$ ) を実現した.<sup>1,2)</sup>

ここでは, 上記のようにけた違いに大規模な DNS (Ultra DNS) を地球シミュレータで実現するために必要な計算科学的手法と結果及び得られた乱流場について概説する.

## 2 Ultra DNS の方法

高レイノルズ数乱流中の小スケール渦の普遍的な統計法則を解明することを目的とした DNS では, Navier-Stokes 方程式をできるだけ簡単な境界条件のもと, できるだけ正確に解くために, 周期境界条件下でフーリエ・スペクトル法を用いることが非常に有効である. フーリエ・スペクトル法では空間の  $x, y, z$  各方向に周期的な乱流場をフーリエ級数展開し, それを有限の波数  $|\mathbf{k}| \leq K_{\max}$  で打ち切り, 展開係数の常微分方程式系を数値積分する. なお, 常微分方程式における非線形項の評価に必要な畳み込み演算は高速フーリエ変換を用いて実空間にて行う. その際問題になるエイリアジングエラーは, 実空間にて  $(1, 1, 1)$  方向に半メッシュだけシフトした格子上で非線形項を再評価することにより完全に除去可能である. また,  $K_{\max}$  と動粘性係数  $\nu$  は  $K_{\max}\eta$  の値により決定する: 一般に  $K_{\max}\eta$  の値が大きいほうが微細な渦構造をより小さいスケールまで正確に

解像できるが実現できるレイノルズ数は小さくなる。なお、 $\eta$  は粘性散逸が支配的になる長さスケール (コルモゴロフ長) である。

スペクトル法を用いる利点は微分演算が正確に行えること及び圧力を求めるためのポアソン方程式が代数演算により正確かつ高速に解けることにある。一方、上記のようにフーリエ・スペクトル法においてエイリアジングエラーを完全に除去し、数値積分に4次のルンゲクッタ法を用いた場合、1時間ステップあたり72回の3次元実高速フーリエ変換 (3DRFFT) を行う必要があるため、3DRFFTをいかに高速に実行できるかが重要となる。

地球シミュレータ (ES) には各々8GFlopsの8つのベクトル演算機 (VP) と16GBの共有メモリを有する計算ノードが640あり、それらは互いに単段クロスバススイッチにて高速通信可能となっている。3DRFFTはベクトル並列化が可能であること及び軸の入換えに膨大な通信が必要であることから、ES用3DRFFTの開発はESの実効性能評価に役立つだけでなく計算科学的にも挑戦的な課題である。我々はESの特性を考慮し(1)バンクコンフリクトを避け、VPのベクトル長256( $\times 8$ Byte)をできる限り確保する、(2)基数4のFFTを採用する、(3)マニュアルマイクロタスクにより各ノード内のVPに均等に計算負荷をかける、(4)高速通信用RCU(リモートアクセス・コントロール・ユニット)の性能を引き出すためMPI.putを使用する等の工夫を行った。特にESではVPの演算速度(8GFlops)とVPとメインメモリのバンド幅(32GB/s)のバランスを考慮すると基数2のFFTより基数4のFFTのほうが演算ネックとなり、演算性能を引き出すことが可能となる。<sup>1)</sup>

表 1: ES のハードウェアモニターにより計算量をカウントして計算した、乱流 DNS プログラム (trans7) の倍精度 [単精度] 演算における TFlops 単位の実効性能と (ピーク性能比)。 $N^3$  は DNS における格子点数、 $n_d$  は用いたノードの数。(文献 [1] より抜粋)

$N^3 \setminus n_d$	512	256	128	64
2048 <sup>3</sup>	13.7(0.43)[ <u>15.3</u> (0.48)]	6.9(0.43)[7.8(0.49)]	–	–
1024 <sup>3</sup>	11.3(0.35)[11.2(0.35)]	6.2(0.39)[7.2(0.45)]	3.3(0.41)[3.7(0.47)]	1.7(0.43)[1.9(0.48)]
512 <sup>3</sup>	–	4.1(0.26)[4.0(0.25)]	2.7(0.34)[3.0(0.38)]	1.5(0.38)[1.7(0.43)]
256 <sup>3</sup>	–	–	1.3(0.16)[1.2(0.15)]	1.0(0.26)[1.1(0.28)]
128 <sup>3</sup>	–	–	–	0.3(0.07)[0.3(0.07)]

### 3 UltraDNS の結果

#### 3.1 実効性能

表 1 と表 2 に前節で概説した工夫により ES 用に最適化した 3DRFFT を用いた乱流 DNS のプログラム (trans7) の実効性能を示す。表 1 の数値は ES のハードウェアモニターのカウンタによる計算量を基に計算したもので、表 2 は表 1 と同一の場合について、基数 4 の 3DRFFT の理論演

表 2: 表 1 と同じ場合について解析的な計算量を用いて実効性能を評価したもの (文献 [1] より抜粋)

$N^3 \setminus n_d$	512	256	128	64
2048 <sup>3</sup>	14.6[16.4]	7.4[8.4]	–	–
1024 <sup>3</sup>	12.2[12.1]	6.7[7.7]	3.5[4.0]	1.8[2.1]
512 <sup>3</sup>	–	4.4[4.3]	3.0[3.3]	1.7[1.9]
256 <sup>3</sup>	–	–	1.4[1.3]	1.1[1.2]
128 <sup>3</sup>	–	–	–	0.3[0.3]

算量を基に計算したものである。表より、同一サイズ ( $N$ ) の DNS では、ノード数 ( $n_d$ ) を増加とともに実効性能もほぼ線形に増加していることが分かる。そして、格子点数 2048<sup>3</sup> の DNS を 512 ノード用いて単精度演算で行ったものが、15.3TFlops(理論上 16.4TFlops) の実効性能の最高速演算を達成していることも分かる。格子点数  $N^3$  が大きい場合に単精度計算が倍精度計算より高速である理由として、単精度ではデータサイズが半分となり 3DRFFT において通信負荷が減ったためだと考えられる。あるサイズの問題では基数 4 の FFT がピーク性能比 0.6 となり、基数 2 の FFT の一般的なピーク性能比 0.3 と比べ大幅な速度向上が確認できた。表 1 よりピーク性能比の最大値が約 0.5 となった大きな理由は基数 4 の FFT の採用が成功したからであると考えられる。<sup>1)</sup>

trans7 では倍精度計算の場合、格子点数  $N^3$  の DNS において約  $25N^3 \times 8\text{Byte}$  のメモリを必要とする。したがって  $N = 2048$  では 1.6TB であるが  $N = 4096$  では 12.8TB となり ES でのトータルなメモリ量 10TB を越える。そのため、我々は 4096<sup>3</sup> の DNS には 3DRFFT 部分は倍精度その他は単精度というハイブリッドな演算を採用した。その結果、使用メモリ量は 7.2TB となり 512 ノードにおいて約 12TFlops、ルンゲクッタ法の 1 ステップあたり約 30 秒の DNS が実現できた。なお、 $N = 1024$  の DNS を用いた予備的な試験では、ハイブリッド計算と倍精度計算のエネルギースペクトルに有意な差異は観測されなかった。

### 3.2 得られた乱流場

図 1(a) は、乱流場における平均エネルギー散逸率 ( $\epsilon$ ) をエネルギー保有領域を特徴付ける、積分長  $L$  と揺らぎ速度成分の 2 乗平均の平方根  $u'$  で規格化したものについて、これまでの DNS で得られていた値に我々の地球シミュレータによる値を追加した図である。図より規格化した平均エネルギー散逸率が  $R_\lambda \rightarrow \infty$  において一定値に漸近していく様子が確認できる。図 1(b) は地球シミュレータで行った一連の DNS において得られたエネルギースペクトルを  $\langle \epsilon \rangle^{2/3} k^{-5/3}$  で規格化したものである。格子点数 512<sup>3</sup> ( $R_\lambda = 257$ ) 及び 1024<sup>3</sup> ( $R_\lambda = 471$ ) の DNS のデータにおいては  $E(k) \propto k^{-5/3}$  となる波数領域が確認できる。一方、格子点数 2048<sup>3</sup> ( $R_\lambda = 732$ ) 及び 4096<sup>3</sup> ( $R_\lambda = 1201$ ) においては  $E(k) \propto k^{-5/3-\alpha}$ ,  $\alpha \approx 0.10$  となることが分かる。後者は Ultra DNS により初めて観察された事実である。<sup>2)</sup>

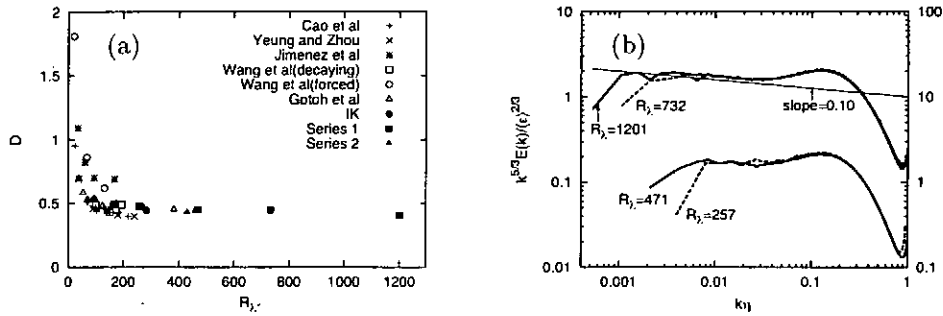


図 1: (a) 乱流中の特徴的な長さや速度成分の大きさを規格化した平均エネルギー散逸率をレイノルズ数  $R_\lambda$  の関数として図示し、従来の結果と我々の DNS による結果 (黒いマーカー) を比較したもの。(b) 地球シミュレータを用いた Ultra DNS により得られた、規格化したエネルギースペクトル。(文献 [2] より抜粋)

#### 4 まとめ

地球シミュレータのハードウェアの有効な性能評価を行うこと、及び超高速かつ超大規模な乱流の DNS を実現することを目指し、地球シミュレータ用に最適化した 3 次元実高速フーリエ変換 (3DRFFT) を開発した。その結果、512 ノードを用いた、格子点数  $2048^3$  の DNS において、16.4TFlops の超高速計算と従来の DNS と比べけた違いに大規模な Ultra DNS (格子点数  $4096^3$ ) を実現した。得られた乱流場は広い慣性小領域 (スケール比約 30 倍) を有し、その可視化結果 (省略) を含め、多くの非自明な乱流の性質を示している。今後、得られた乱流場が、乱流の統計力学の構築に貢献すべく、様々な基礎データを提供していくと考えられる。

#### 参考文献

- [1] Yokokawa, M., Itakura, K., Uno, A., Ishihara, T. and Kaneda, Y., *16.4TFlops direct numerical simulation of turbulence by a Fourier spectral method on the Earth Simulator*, <http://www.sc-2002.org/paperpdfs/pap.pap273.pdf> (2002).
- [2] Kaneda, Y., Ishihara, T., Yokokawa, M., Itakura, K. and Uno A., *Energy dissipation rate and energy spectrum in high resolution direct numerical simulations of turbulence in a periodic box*, *Physics of Fluids* **15**, L21–L24 (2003).



# 乱流秩序渦構造による混合現象の理解

後藤 晋<sup>†</sup>, 木田重雄

(核融合科学研究所 理論・シミュレーション研究センター)

## 1 目的

乱れた流れ(乱流)が, 分子運動と比べて格段に強い混合能力をもつことは直観的には明らかである. しかし, 乱流がどのように効果的な混合を生み出しているかの詳細は実はよく分かっていない. 一方で乱流中には秩序立った渦構造が普遍的に存在することが最近の乱流の数値シミュレーションによって次第に明らかになってきた. そこで, 乱流の強い混合能力を秩序渦構造の働きとして理解できないかと考える. 本研究では秩序渦構造の集団運動に注目し, 乱流混合の一面を理解する.

## 2 乱流混合の定量化 — 流体線や流体面の伸長

乱流混合の研究の困難さのひとつは, 混合の客観的な定量化が簡単ではないことにある. 混合の定量化のひとつの手法として, 流体中に受動的に移流される仮想的な曲線や曲面(それぞれ, 流体線, 流体面 [1] と呼ばれる)の変形や伸長を定量化する方法がしばしば用いられてきた. 本研究でもこれを採用する. 一般には乱流中の流体線や流体面の追跡の数値シミュレーションはやさしくないが, 本研究では, 非圧縮流体の一様等方乱流中の流体線や面の運動を高精度で追跡する.(シミュレーション手法は, 流体線については文献 [2] を, 流体面については文献 [3] を参照.)

シミュレーション結果の例として乱流により変形された流体面の様子を図1に示す. 流体面は非常に複雑に変形されている. この系の特徴のひとつは, 流体線の全長や流体面の全面積が指数関数的

に伸長されることである [1-5]. 例として, 図2に流体面の全面積の時間発展を示す. 時間発展のごく初期を除き, 流体面の全面積は指数関数的に増大している. 同様に流体線の全長も指数関数的に伸長されることが示されている(詳細は文献 [2,5] を参照).

この強い伸長は, 乱流の強い混合能力を反映していると想像される. なぜなら流体面は流体の2つの部分の境界面であるので, その指数関数的な伸長は2つの部分の接触面積が指数関数的に増大することを意味するからである. そこで, この指数関数的伸長の起源を探ることにより, 乱流の強い混合の物理機構の理解を試みる.

ところで, 図2には異なるレイノルズ数の乱流場における流体面の全面積の時間発展を示した. 時間をそれぞれの流れのコルモゴロフ時間  $\tau_\eta$  で規格化すると, 時間発展はレイノルズ数には依存しないことが分かる. コルモゴロフ時間は一様乱流中の(ラグランジュ運動の)最小時間であるから, 流体面や流体線の変形や伸長は小さいスケールの渦に支配されていると想像される.

## 3 乱流中の秩序渦構造

これまでに乱流中の秩序構造を同定するさまざまな方法が提案されてきた. ここでは低圧力渦の方法 [6] を用いる. この方法は, 流体粒子の旋回運動が一般に相対的な低圧力領域を伴うことを利用して, 渦を客観的に同定するものである. 同定された典型的な秩序渦構造を図3に示す. これらの渦の第一の特徴は細長い管状の構造をしていることである. より正確には秩序渦構造の半径はほぼレイノルズ数によらずに  $5\eta$  程度, また周方

<sup>†</sup>email: goto@toki.theory.nifs.ac.jp

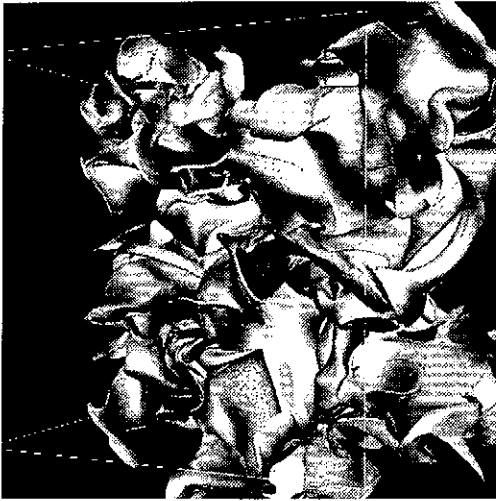


図 1: 乱流によって変形をうけた流体面。初期には平面であった。  $t = 10\tau_\eta$ 。テーラー長に基づくレイノルズ数  $R_\lambda = 57$ 。

向の流体粒子の相対旋回速度は  $3.5\eta/\tau_\eta$  程度であり、これらの渦の断面方向の構造は(乱流中の最小長さとして最短時間である)コルモゴロフ長さ  $\eta$  とコルモゴロフ時間  $\tau_\eta$  とで特徴づけられるようである。一方、秩序渦構造の長さは、 $O(\eta)$  のものから積分長(乱流中の最長長さ)にまでおよぶものが存在する。したがって、流体線や流体面の伸長は秩序渦構造の断面方向の構造と深い関係があるようである。

ところで、この管状の秩序渦構造の集団が興味深い性質を示すことが分かった。すなわち、図3を注意深く観察すると、渦が互いに反平行に揃う傾向があることに気づく。この傾向を定量的に評価するため、図4に渦間距離で条件づけられた渦どうしの角度の余弦の確率密度関数を示す。余弦の符号は渦度ベクトルの方向に基づく。つまり、 $\cos\theta = -1$  は反平行渦対、 $\cos\theta = 1$  は平行渦対に対応する。図4より、渦対間の距離が比較的に近い場合には反平行渦の割合がもっとも多いことが分かる。

#### 4 秩序渦構造による混合促進

前節で述べたように流体線や流体面の伸長や変形は、管状秩序渦構造の断面方向の流れ場と関

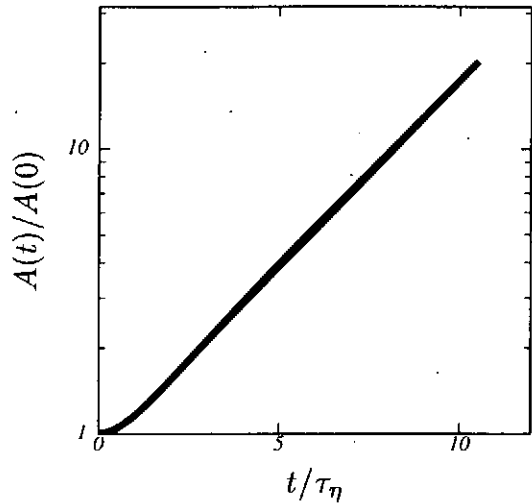


図 2: 流体面の全面積の時間発展。太線  $R_\lambda = 57$ 、細線  $R_\lambda = 84$ 。20 通りの初期条件に対する平均。

係が深い。また、秩序構造渦は互いに反平行に揃う傾向がある。したがって、以下では秩序渦構造の断面方向の流れ場と、その断面付近での流体線や流体面の伸長の様子を調べることで、流体線や面の指数関数的伸長の物理機構を理解する。

ある秩序渦構造の断面における流れ場の様子を図5に示す。渦は図の中心に位置し、また図の一边の長さはおおよそ  $50\eta$  である。前節の議論より期待されるように、この図中にも反平行渦対が観察される。図5(a)の等高線は渦度の断面に垂直な成分を表す。灰色の領域が正の領域であるが、図の右上(および左下)に中心とは逆向き渦が存在していることが分かる。また、図5(b)の矢印は図の中心からの相対速度場の断面に平行な成分を示す。この相対速度場では渦の中心付近に楕円型淀み点(●)が存在し、一方、反平行渦対の間にはふたつの双曲型淀み点(■)が存在する。図5(b)に示すように、双曲型淀み点の近傍では歪み場が強くなっている。

反平行渦対が誘起する流れ場の渦対の断面上での特徴は次のようにまとめられる。上でみたように、渦対に相対的な座標系では、渦対の間に双曲型淀み点が2つ存在し、その付近では歪み場は強い。また、一般に双曲型淀み点近傍では、歪み場の伸長方向と流線とが平行に近いことが示される。ここで伸長方向とは歪みテンソルの正の固



図 3: 低圧力渦の集団. それぞれの渦は管状構造をしている. 管内の渦度ベクトルの方向はほぼ黒く塗った端からもう一方の端へ向く. 反平行渦対が多く観察される.

有値に対応する固有ベクトルの方向のことである. 定常な流れ場においては, 一旦, 流線と平行になった流体線の部分 (線素) は, つねに流線と平行である. したがって, 流線に沿って流れてきた流体線素は双曲型淀み点付近で非常に強く伸長されることが期待される.

上の議論を確認するため, 乱流中に非常に多くの流体線素を移流するシミュレーションを実行し, 考えている断面付近にあるものの正射影を図 5(c) に示す. 渦対の近傍においては流体線が流線とほぼ平行に揃う傾向があることが分かる. これは渦対とともに動く座標系における流れ場の近似的な定常性に起因する. また, 図 5(d) に, 流体線素の伸長率の大きさの等高線を示すが, 期待通り, 双曲型の淀み点近傍で大きな値をとっている. これは, 渦対とともに動く座標系において双曲型淀み点近傍で歪み場が大きな値をとり, また, 流線が伸長方向と揃っていることに起因する.

## 5 結論

非圧縮流体の一樣乱流中には管状の秩序渦構造がレイノルズ数に依らずに普遍的に存在する. これらの秩序渦構造は管状をしており, 互いに反

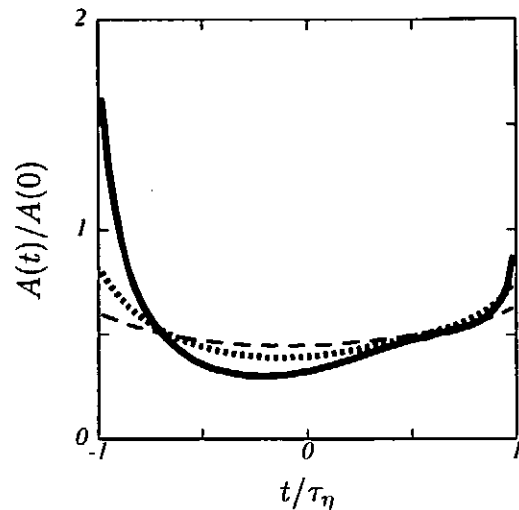


図 4: 渦対の角度  $\theta$  の余弦の確率密度関数. 実線, 渦間距離  $l$  が  $20\eta$  以内のもの. 点線,  $20\eta < l < 40\eta$ . 破線,  $40\eta < l < 60\eta$ .

平行に揃う傾向を示す. 反平行渦対が生み出す流れ場は, その断面上で, 渦対とともに動く座標系において 2 つの双曲型淀み点をもつ. さらに渦対が誘起する流れ場は, これらの淀み点付近に強い歪み場を生成し, また, その付近の流線は伸長方向とほぼ平行となる. 定常場では流線と流体とは平行に揃う傾向があるので, 淀み点付近で流体線の強い伸長が起こる. これが乱流が生み出す強い流体線やその集合である流体面の強い伸長の主要な物理機構であると考えられる [7].

数値データ解析に関して横原孝文博士の協力を得た. 本研究は文部科学省科学研究費特定領域研究 (B) の部分的支援を受けた.

## 参考文献

- [1] Batchelor, G. K., "The effect of homogeneous turbulence on material lines and surfaces," Proc. Roy. Soc. London A 213 (1952) 349-366.
- [2] Kida, S., Goto, S., "Line statistics: Stretching rate of passive lines in turbu-

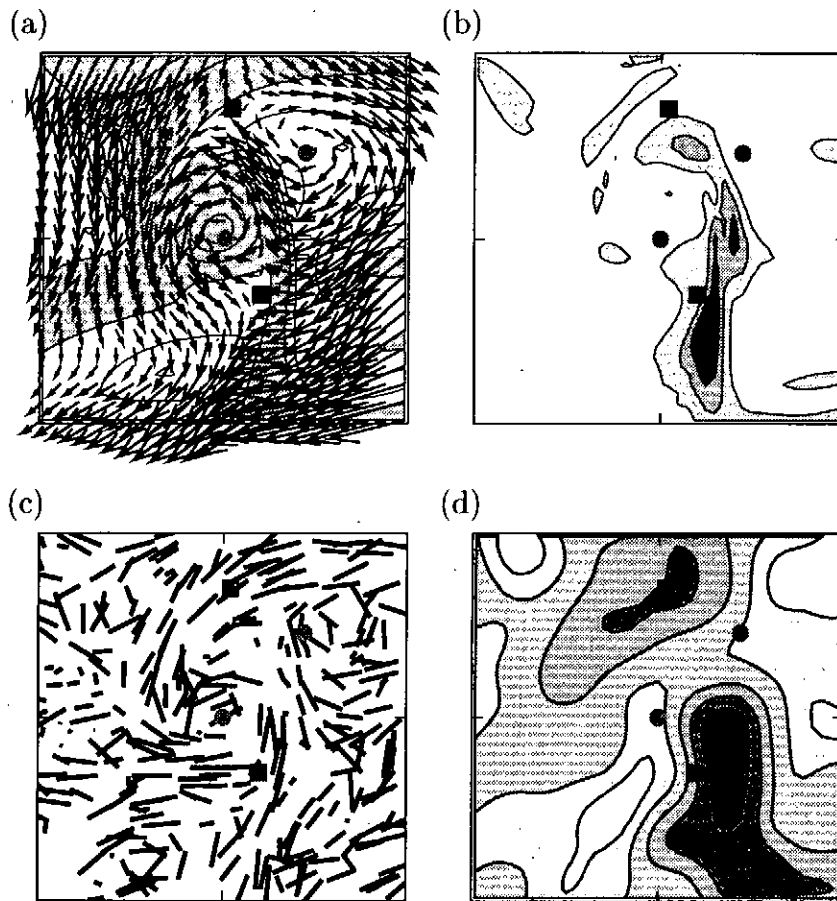


図 5: ある秩序渦の断面における流れ場, および付近の流体線の伸長の様子. (a) 渦度の断面に垂直な成分の等高線, および断面の中心に対する相対速度の断面に平行な成分. ■は双曲型淀み点, ●は楕円型淀み点. (b) 歪み場の強さの等高線. (c) 断面近傍の流体線素の断面への正射影. (d) 断面近傍の流体線素の伸長率の等高線.

lence,” *Phys. Fluids* **14** (2002) 352–361.

[3] 後藤晋, 木田重雄「流体面の伸長率に対する Batchelor の仮定の破綻」数理解析研究所講究録 **1285** (2002) 193–200; 「乱流中の浮遊曲線の統計」同 **1226** (2001) 111–120.

[4] Girimaji, S. S., Pope, S. B., “Material-element deformation in isotropic turbulence,” *J. Fluid Mech.* **220** (1990) 427–458.

[5] Goto, S., Kida, S., 2002. “Multiplicative process of material line stretching by turbulence,” *J. Turbulence* **3** (2002) 017.

[6] Miura, H., Kida, S., “Identification of tubular vortices in turbulence,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **66** (1997) 1331–1334.

[7] Goto, S., Kida, S., “Enhanced stretching of material lines by antiparallel vortex pairs in turbulence,” (2002, submitted, preprint NIFS-765).

# 没入型 VR 装置におけるボリュームレンダリング実行環境の開発

大野暢亮\*, 田村祐一\*, 佐藤哲也†

\* 核融合科学研究所 理論・シミュレーション研究センター

† 海洋科学技術センター 横浜研究所 地球シミュレータセンター

## I. ボリュームレンダリングについて

ComplexCope によるスカラー場の可視化については、等値面や contour plot を利用していた。しかし、3 次元のスカラー場全体の把握をしたい場合には限界があり、新たな可視化手段を ComplexCope に持たせる必要が出てきた。スカラー場全体の把握をするのに適した可視化手段の一つに、ボリュームレンダリング法がある。

ボリュームレンダリング法とは、ボリュームデータのボクセルと呼ばれる単位に不透明度を与え、3 次元のデータをモニターに半透明な形で直接表示して、その内部の構造まで明らかにする手法で、複雑なデータ同士の空間的な関係を理解するのに適している。

この可視化法は、X 線 CT 等の断層画像の可視化に利用することも出来るので、CAVE で実行可能になれば、シミュレーション研究のみならず、VR 装置の医療や非破壊検査など産業への応用の道を開く可能性がある。

レイキャスティング法を用いた、一般的なボリュームレンダリング法について、簡単に説明する。

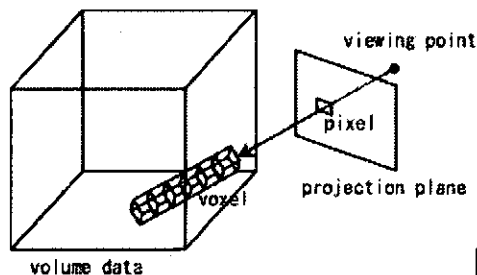


Fig.1 Volume Rendering の概念図

投影面を通過する視線を視点からのばし、ボリュームデータ内に到達したら、その視線に沿って不透明度  $\alpha$  を与えてあるボクセル(2次元の図は、ピクセルと呼ばれる正方形の画素の集合である。これを3次元に発展させ、ボクセルと呼ばれる立方体の集合で表現するのがボクセル表現である。)のデータを一定間隔で  $\alpha$  を重みとして加算し、視線が通過した投影面のピクセルの値(色、輝度)を決定する(Fig.1 参照)。これを投影面のすべてのピクセルに対して実行し、最終的に投影面に半透明な図形を描く方法がボリュームレンダリングである。

## II. ComplexCope でのボリュームレンダリング実行

ComplexCope でボリュームレンダリングを実行する上での問題点は、

『常に視点・視線が変化するので、投影面に像を描き続けなければならない。実用的なレンダリングスピードを出すことは困難』である。

この問題を解決する為に採用した手法

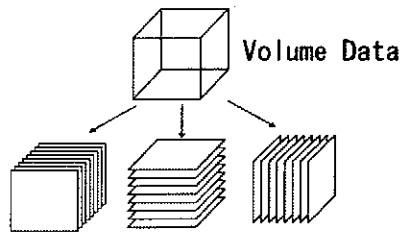


Fig.2 採用した手法の概念図

半透明なテクスチャを前後に並べ、テクスチャ同士の混合された像を表示することで、ボリュームレンダリングを行う方法が知られている。

この方法は、データから 3 方向のスライス画像群を作成 (Fig.2 参照)、メモリに保存、視点とデータの中心を結ぶ線分と交差する面を判断基準とし、表示する画像群を決定する。視点がデータ内にある場合は、視線方向を判断基準とする。

### 評価

レイキャスティング法とフレーム更新数の比較

#### 比較条件

#### 共通の条件

- (i) 使用するデータ: 256×256×124pixel, 表示サイズ: 2×2×1feet.
- (ii) ボクセルの不透明度: 一定.
- (iii) 最もフレーム更新数が落ちる方向から 1.5feet の距離まで近づく.

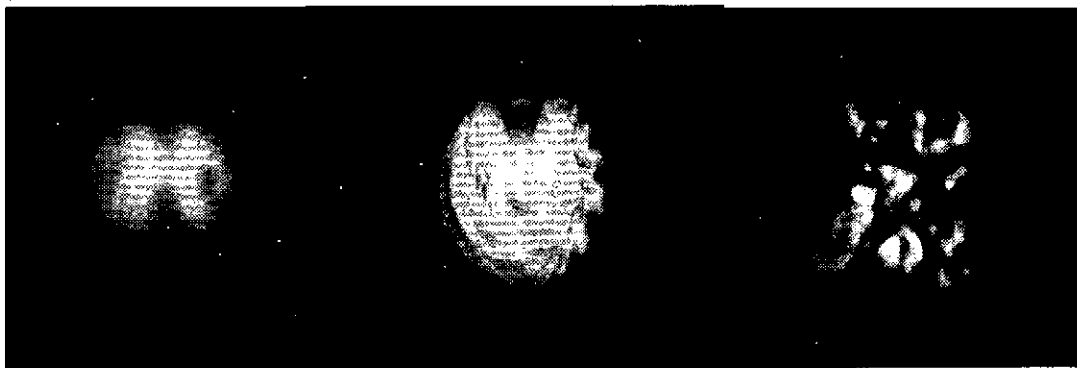
#### レイキャスティング法に課した条件

- (i) 投影面の大きさは 256×256pixel, サイズ: 2×2feet.
- (ii) 投影面と視点の距離は 1.5feet.

結果 (単位: fps=frames per second, 最大 48 fps)

	Simulator (mono)	Simulator	CompleXscope
Ray Casting 法	0.6	0.4	0.4
採用した手法	46.3	23.9	4.2

### III. 表示例



ex. 1, 2 球状トカマクの圧力分布

ex. 3 乱流の圧力分布・低圧部

ex. 1, 2: 核融合研究所・水口直紀博士, ex. 3 核融合科学研究所・三浦英昭博士に提供していただきました。

## テクスチャマッピング・ボリュームレンダリングを利用した 人体 CT 画像の没入型 VR 三次元表示

博田竜史、長谷川建治、菅 信一<sup>1</sup>、大野暢亮<sup>2</sup>、田村祐一<sup>2</sup>、陰山 聡<sup>3</sup>、堀内利得<sup>2</sup>

北里大学大学院 医療系研究科 脳機能科学、<sup>1</sup>同、放射線科学

<sup>2</sup>文部科学省 核融合科学研究所 理論・シミュレーション研究センター

<sup>3</sup>海洋科学技術センター 横浜研究所 地球シミュレータセンター

### はじめに

X線 CT (Computed Tomography) 撮影の技術発展は目覚ましく、今日では、CT 撮影した部位をコンピュータ上に三次元再構築して病巣を探るといった画像診断が臨床的に行われている。3DCT (three-Dimensional Computed Tomography) と呼ばれるその三次元像は、複数枚の CT 画像から、主としてボリュームレンダリングによって CRT ディスプレイ上に再構築される。このような、CRT ディスプレイ上に再構築された人体のボリュームレンダリング像は、3DCT での利用のみならず、器官の形状解析といった形態学的研究や、数値モデルによる生体シミュレーション研究などに利用されている。同様の像を描画する媒体として、VR システムを用いれば、あたかも目の前に実在しているような仮想人体模型を得ることができ、応用範囲はさらに広がる。

我々は、画像診断、形態把握、および数値モデルによる生体シミュレーション結果の可視化に応用可能な仮想人体模型を、CAVE 上で可視化した。対象は、日本人成人男性の全身(頭部から踝まで) および心臓である。まず、それらの対象を X線 CT 装置にて撮影し、連続した断層画像を取得した。次に、ボリュームレンダリング像を CAVE 上で可視化するプログラムを作成した。最後に、対象となる X線 CT 画像を加工して CAVE 上で三次元再構築し、描画速度を測定し、ピクセル処理によって同一データから体表面や骨格、レントゲン様などの複数の像を得た。心臓に関しては、複数の心時相分の画像を取得した後、それらの画像を順次切り替える機能を可視化プログラムに付加し、擬似的に拍動の様子を再現した。

### 材料と方法

#### (1)人体断層画像の取得

我々は、北里大学病院放射線科の協力を得て、X線 CT 装置により、日本人成人男性の全身および造影剤を使用した心臓の連続断層画像を取得した。使用した X線 CT 装置は、全身撮影時には LightSpeed Plus、心臓撮影時には LightSpeed Ultra16 である(ともに General Electric Company 製)。撮影範囲は、全身が頭部から踝まで約 160cm(使用した X線 CT 装置の撮影限界)、心臓が大動脈弓の半ばから肝臓上部(横隔膜部分)まで約 15cm

である。撮影状況は、全身がスライス厚 2.50mm、スライス間隔 1.25mm、取得画像数 1281 枚であり、心臓がスライス厚 1.25mm、スライス間隔 1.25mm、取得画像数 118 枚である。ただし、心臓に関しては、心拍の動画表示を実現させるため、1 拍動を 10%ずつ 10 分画した各心時相での画像を取得した。従って、心臓撮影にて得た総画像枚数は、118 枚（ひとつの心時相での心臓画像数）×10（心時相数）=1180 枚である。これらの断層画像は全て、医用画像の汎用形式である DICOM（Digital Imaging and Communications in Medicine）形式で取得した。

## (2)三次元再構築プログラム

本研究では、仮想人体模型をボリュームレンダリングで三次元再構築するプログラムを作成した。三次元 CG の描写には、汎用の三次元グラフィックスライブラリである OpenGL を用いた。CAVE での描画の高速性を確保するため、描画アルゴリズムには、テクスチャマッピングによるボリュームレンダリングの方法を用いた[1][2]。

プログラムの動作を X 線 CT 画像の診断時に近づけるため、描画プログラムに以下の機能を追加した。

### i)透明度変化

テクスチャの透明度をリアルタイムに変更する機能。

### ii)ピクセル輝度の閾値変更

ピクセル輝度に閾値を設定し、その値を変動させ、骨部分の表示や、逆に骨部分以外の表示を行う機能。

### iii)拍動の動画表示（心臓のみ）

複数の画像セットを連続的に切り替える機能。

## (3)画像の加工

本研究で使用した全ての医用画像に対し、ウインドウ設定（補足 1）、画像形式の変換、可視化部分の切り抜きおよび画像縮小の操作を行った。まず、X 線 CT 装置から DICOM 形式の画像を得た後、全ての画像にウインドウ設定を行った。ウインドウは、像が鮮明に映る値をあらかじめ確認し、全身、心臓ともに WL40、WW400 に設定した。次に、ウインドウ設定を終えた画像を、二次元画像の形式として広く用いられている BMP 形式に変換した（可視化プログラムは、BMP 形式の画像を読み込むように作成した）。X 線 CT 画像はグレースケールであるため、BMP 形式のフォーマットは 8bit のグレースケールとした。次に、画像から可視化させたい部分を切り抜いた。本研究で撮影した X 線 CT 画像は、画像の中央部分に人体および心臓が写っていたため、可視化させる必要のない空間部分を、切り抜きの作業により除去した。最後に、対象の形態把握が可能な範囲で画像の縮小を行い、描画のインタラクティブ性を確保した。それらの画像処理の結果、画像 1 枚あたりの画素数



は、全身で 128x64 pixels、心臓で 128x128 pixels となった。

#### (4)表示システム

本研究では、三次元再構築像の可視化システムとして、文部科学省核融合科学研究所、理論・シミュレーション研究センター所有の四面 CAVE システム CompleXcope [3]を使用した。CompleXcope は、一辺 10 フィート（約 3 メートル）の立方体空間の正面、両側面及び下面にスクリーンを持ち、描画エンジンとして 2 台のグラフィックワークステーション（Onyx2, Silicon Graphics 社製）を使用し、磁気によるヘッドトラッキングシステム、三次元マウス、三次元立体音響装置を備えた、液晶シャッター方式の CAVE である。

### 結果

#### (1)全身像の描画

全身の断層画像（128x64 pixels、1281 枚の BMP 画像）から三次元再構築した仮想全身模型を、CompleXcope にて可視化した（図 1、PC 上に描画した画像）。描画速度は 16～24fps（CAVE シミュレータ値、水平視点、全身は等身大表示）となった。透明度 0%（完全不透明）で表示した像は、不透明な人体トルソと同様の体表面像になる。透明度を上げると、各器官の位置関係の把握が可能なレントゲン様像の表示を行うことができた。また、ピクセル輝度の閾値を変化させ、骨格の抽出を行うことができた。これは、組み立てられた模型である交連骨格模型と同様の像である。

テクスチャマップを使用したボリウムレンダリングは、画像間の補完を行わないため、本研究で三次元再構築した仮想全身模型の体表面には、縞状の人工産物（アーチファクト）が明確に見られた。

#### (2)心臓の描画

心臓の断層画像（128x128 pixels、118 枚×10 セットの BMP 画像）から三次元再構築した仮想心臓模型を、CompleXcope にて可視化した（図 2、PC 上に描画した画像）。描画速度は 16～24fps（CAVE シミュレータ値、水平視点）となった。造影剤が使用されているため、周囲の組織と比較して血液はより白色に写っている（＝輝度が高い）。このため、ピクセル輝度の閾値処理によって血液を非表示にし、心室内および血管内の様子を確認することができた。この作業によって、特に左心室内の乳頭筋が明確に描出された。各心時相での画像セットを切り替え、擬似的に心拍の動画を表示したところ、乳頭筋収縮の様子を確認することができた。こういった、対象物の外観や動きを把握することは可能であったものの、心臓内腔や血管壁といった組織表面部分ではテクスチャの断面が露わになり、明確なアーチファクトが生じた。

## 考察

本研究では、全身、心臓ともに、おおまかな形態把握が可能な画質を保ったままインタラクティブな速度での可視化を行うことができた。この結果の応用範囲は広い。全身像に関して言えば、同一の画像データを元に、不透明な人体模型の表示と交連骨格模型の表示とを任意に切り替えることができるデジタル人体模型の制作は、今回行った可視化の結果により、表示機能および描画速度の面で十分実現可能であることが判明した。また、心臓に関して言えば、奥行きのある VR 空間を利用して心臓の動的診断を行うというもの、ひとつの方向性として考えられる。心臓の動的診断は、本研究の目標のひとつである、CAVE を用いた画像診断に直結する。ただし、実際に CAVE を用いた画像診断を実現させるには、いくつかの問題点をクリアしなければならない。まず、現状ではウインドウ設定後の画像を用いて三次元可視化を行っているが、CAVE 上でウインドウ設定を行うことができるような状況を実現しなければ、画像診断時の効率を上げることはできない。また、X 線 CT 装置から得た二次元画像を、縮小による劣化なしに三次元再構築する必要がある。特に画像診断時には、画質の劣化に細心の注意を払わなければならない。たとえばテクスチャの断面によるアーチファクトは、骨稜部分を視る際の障害となるであろう。バーチャルエンドスコーピー（補足 2）のように管表面を視る際には、表面の再現性が高いレンダリング方法を用いるべきである。こういった、状況に応じた適切なレンダリング方法の切り替えは、今後の課題である。

### 補足 1: ウインドウ設定

16bit の色階調を持つ DICOM 形式の画像データから、任意の範囲で 8bit の色階調を抜き出し、診断部分を強調すること。抜き出す範囲を決めるパラメータは、抜き出し中心の WL (Window Level) および抜き出し幅の WW (Window Width) である。

### 補足 2: バーチャルエンドスコーピー

X 線 CT や MRI の立体画像から、内視鏡に限りなく近い映像を得るための技術。

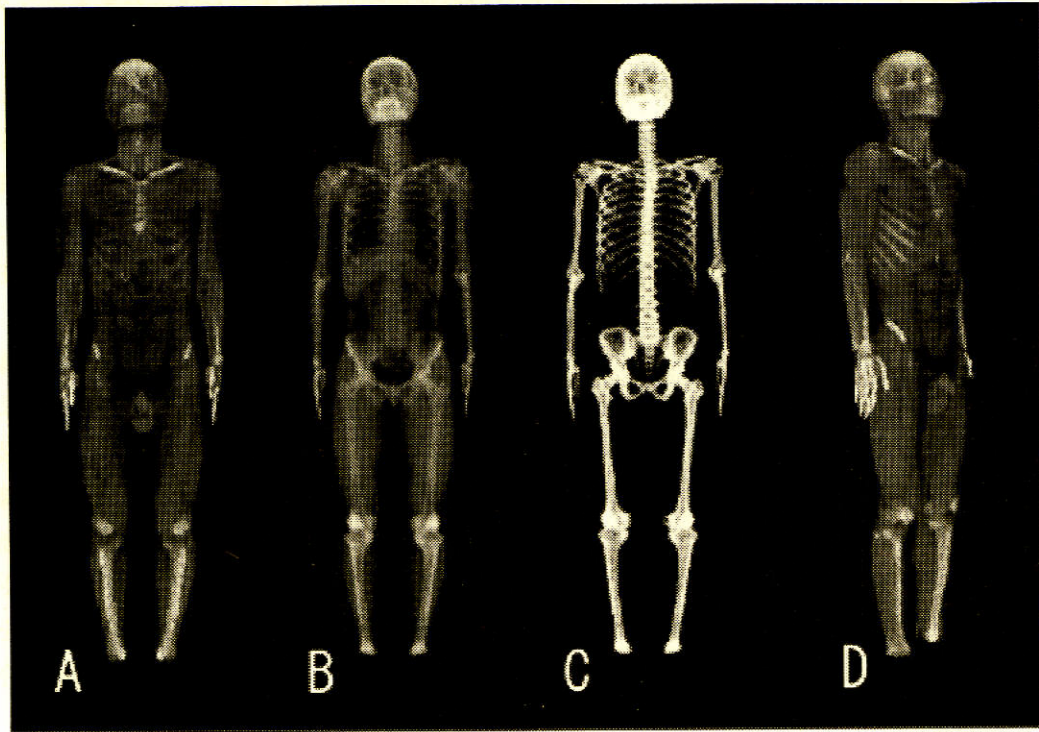


図1 テクスチャマッピングを利用したボリュームレンダリングによる全身像  
 (A)完全不透明像；(B)半透明像（不透明度 10%）；(C)骨部分抽出像；(D)側面像

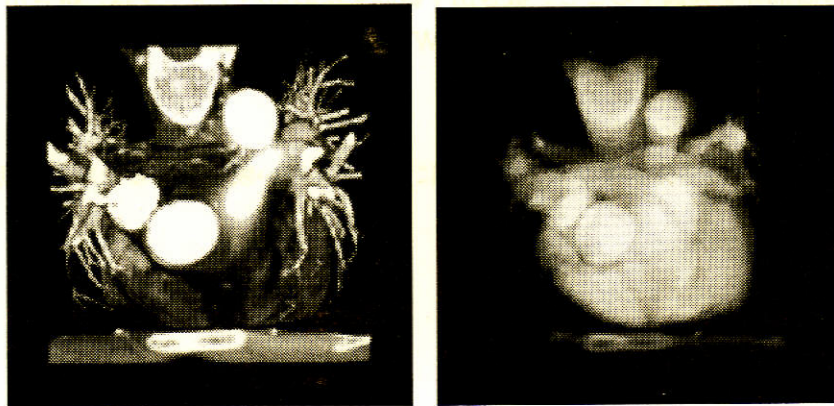


図2 テクスチャマッピングを利用したボリュームレンダリングによる心臓上部  
 左：完全不透明；右：半透明（不透明度 10%）

#### 参考文献

- [1]M. Brady, K. Jung, H.T. Nguyen, and T. N. Guyen (1997) Two-phase perspective ray casting for interactive volume navigation. In *Visualization 97*:183-192.
- [2]大野暢亮, 田村祐一, 佐藤哲也 (2003) 研究開発レター「没入型 VR 装置におけるポリウムレンダリング実行環境の構築」電気学会論文誌 3:123,c, 印刷中.
- [3] 陰山 聡, 佐藤 哲也 (1998) VR による核融合シミュレーションデータの可視化 第 4 回コンピュータビジュアライゼーションシンポジウム論文集 :61-64.

# 題目: 分子動力学を用いた電子顕微鏡三次元像からの

## 原子モデル構築への試み

所属: 九州工業大学・情報工学部・生物科学システム工学科  
著者名: 安永卓生、野田和弘

### 1. 研究目的

電子顕微鏡法を用いると、水溶液中のタンパク質の三次元構造（電位マップ）を決定することができる。現状、結晶性をもつタンパク質の場合には、原子の配置を議論できるまでの分解能をもつ三次元構造を決定することに成功している。しかし、ほとんどは 1 nm 程度の分解能にとどまっている。これは、「電子顕微鏡により得られたタンパク質の二次元投影像がどの向きの投影像であるかを明確に決定することが困難である」という構造解析での難問に主として起因するが、実際にタンパク質が結晶内のような同じ構造をとっていないという事にも起因すると考えられる。しかし、原子レベルの議論ができないため、第一印象としての役割を果たす以上には、生命科学の問題を解決するために他の研究手法に提供できる情報が乏しい。

一方で、電子顕微鏡法は、1 ナノメートル程度の分解能の水溶液中でのタンパク質構造を容易に明らかにすることができる。X線結晶解析や NMR などの他の構造生物学的手法により、原子レベルの構造が明らかなタンパク質は多い。しかし、水溶液中で、タンパク質 1 分子 1 分子が、どのような動的構造をとっているかを知るのは困難である。

そこで、本研究では、原子モデルのわかっているタンパク質を対象として、分子動力学的手法を導入することにより、電子顕微鏡法から得られた低分解能の三次元構造（1 nm 程度の分解能）から、原子レベルの構造情報を構築するための手法を開発することを試みた。

### 2. 方法

本手法の骨子は、異なる構造を持つ X線結晶解析法などにより解かれたタンパク質の原子モデルを、タンパク質分子の存在し得る空間を制限することにより、電子顕微鏡によって得られた密度マップ（電位マップ）を説明できるように変形し、水溶液内のタンパク質構造の原子モデルを構築することにある。そこで、我々は、Spatially-restricted Molecular Dynamics (SRMD: 空間制限分子動力学法)を提案する。

タンパク質の分子動力学計算(NAMD を使用)を行う際に、電子顕微鏡法による三次元密度マップをポテンシャルとして取扱い、その勾配を外力として導入した。分子動力学計算ソフトウェアである NAMD は、外力を容易に取り込むことができるので、本計算に用いた。

更に、本来、タンパク質の分子動力学計算の計算時間では達し得ない時間スケール(ナノ秒以上)の動きを行わせるために、以下に述べる摂動を加える事を試みた。

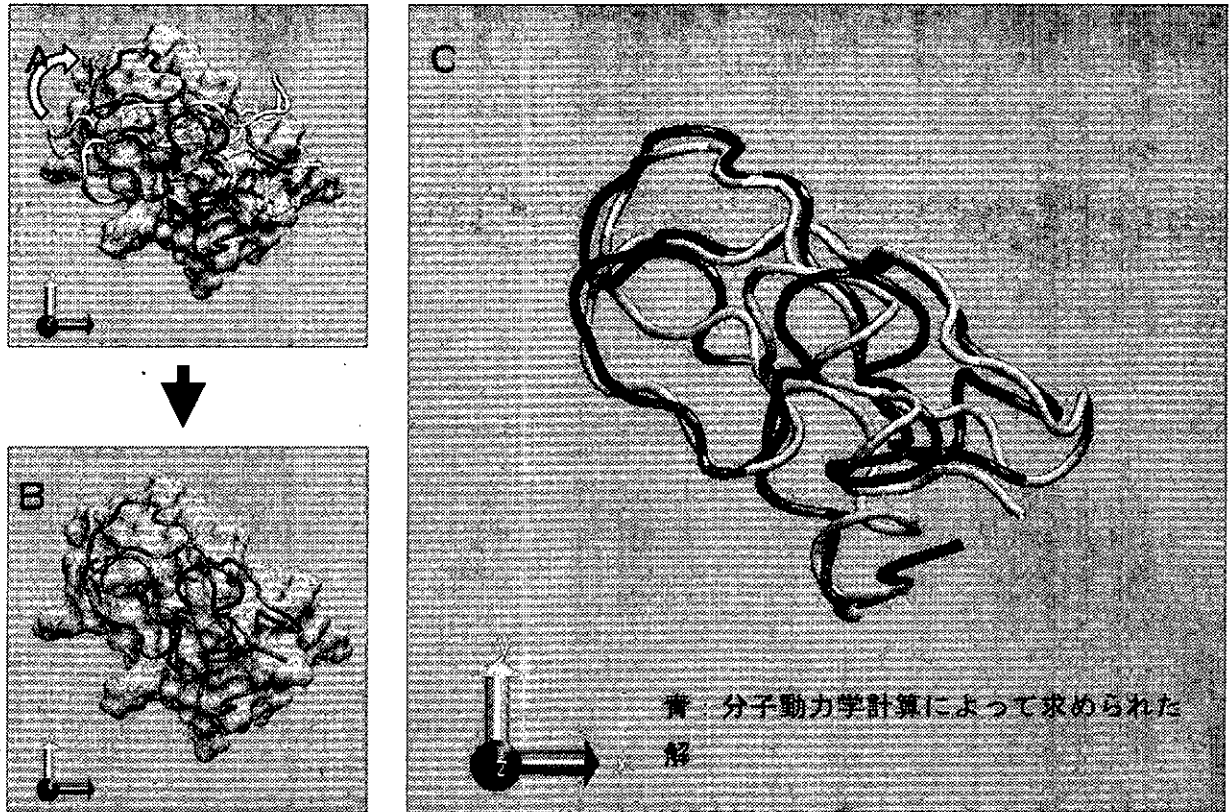
- 焼き鈍し(stimulated-annealing)
- タンパク質全体の平行移動 (ミリ秒)、回転移動 (マイクロ秒)  
(酔歩として取り扱う。)

- タンパク質の Normal mode analysis など期待される大規模な構造揺らぎ (ナノ秒)

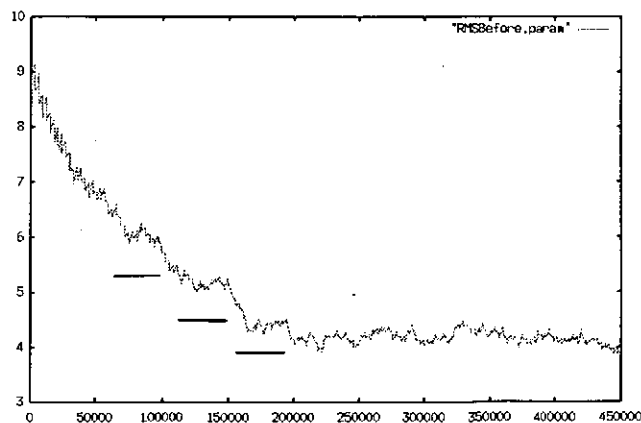
### 3. 結果と考察

モデルタンパク質として、トリプシンインヒビターを用いた。これは、原子数が 900 程度であり、最終的に電子顕微鏡で解くことのできる分子量 10 万程度のタンパク質の通常のタンパク質のサブドメインのモデルとして適しているからである。

最終解である青色で示された構造から電子顕微鏡モデル (緑色の密度マップ: 1 nm 程度の分解能) を創出し、その密度マップに対して、初期構造である黄色で示された原子モデルを SMD 法によりフィットすることを試みた。以下に示した図は、SMD 法に基づいた計算結果を示している。



黄色で示された初期構造から、緑の密度マップへ駆動され (A)、最終的に緑の構造にうまく収まっている (B)。この場合は正解 (Cの緑のチューブ) を知っているの、重ね合わせてたところ、非常にうまくフィットしている。二つの構造の主鎖構造の違い (root mean square deviation: RMSD) は下図にみられるように 0.3-0.4 nm 程度に収まった。従って、詳細な構造ではずれがみえ



るものの分子全体はほとんどうまくフィットできていると考えることができる。この際、タンパク質全体の回転緩和方向に対して酔歩的な摂動をかけない場合には、局所エネルギー最小構造となってしまう、うまく収束しなかった。従って、マイクロ秒と

言われる回転緩和項を含めたことが有効に働いたと考えられる。実際、回転緩和項をいれた計算でも、左図中の実横線に示すように、所々である一定の時間、RMSが減少しない時間帯が観察される。これは、密度マップからのエネルギーも併せて、局所エネルギー最小構造になっているためと考えられる。今後、巨大なタンパク質を取り扱う場合には、この局所エネルギー最小構造から抜け出すことができない可能性が示唆される。そこで、巨大タンパク質の場合にはノーマルモード解析法などと組合わせて、タンパク質内部のサブドメインレベルの動きを取り込む必要が生じるものと考えられる。

また、焼き鈍し(simulated annealing)法の際に、400 Kと温度を上げて密度マップポテンシャルによる拘束がある場合には構造の破壊が起こらないことが分かった。これは、密度マップがタンパク質構造をコンパクトになるように拘束するために、温度上昇による、総エネルギーにおけるエントロピー項増大からくる、構造の破壊がおきにくくなるためである。従って、焼き鈍しに関する条件を更に検討することにより、収束時間を短縮できる可能性がある。

#### 4. 結論と今後

以上の結果から、今回の報告を以下の様にまとめることができる。

- ① 密度マップから求めた力場・平行移動・回転移動の摂動と分子動力学法を組み合わせることができた。
- ② その手法をトリプシンインヒビター（原子数:900）を密度マップにフィットするように駆動することができた。
- ③ このことは、通常のタンパク質(原子数：数千)のサブドメイン（原子数：数百）を、このSRMD (spatially-restricted molecular dynamics)の手法で駆動し、電子顕微鏡からの三次元電位マップにフィットすることができる可能性を示唆している。

今後、大きい分子量のタンパク質のサブドメインを駆動することができるかどうかを検討し、電子顕微鏡によって得られた現実の三次元の電位マップにフィットすることを試みたいと考えている。

また、現在、計算時間が増大している。これは、外力の導入の際に、データの取り込み、初期化に時間がかかっているためである。そこで、NAMDを中心として、ソフトウェアの改良を行いたいと考える。

## 電流不安定性の非線形発展と<sup>3</sup>He イオンの選択的加速

樋田美栄子, 奥村隼人  
名古屋大学大学院理学研究科

太陽フレアにおける<sup>3</sup>He 過剰現象とは、フレア時に生成される高エネルギー粒子の中で<sup>3</sup>He の存在量が極めて大きくなる現象である。これは<sup>3</sup>He 粒子が選択的に加速された結果であると考えられている。この選択的加速において電流不安定性が重要な役割を担っているものとみなされており、これまでいくつかの理論モデルが提案されてきたが、その主なものは弱い電流 ( $v_d < v_{Te}$ ,  $v_d$  は磁場に平行方向の電子のドリフト速度、 $v_{Te}$  は熱速度) による不安定性の線形理論に基づくものであった。しかし、<sup>3</sup>He 過剰現象はバースト的に発生する高速電子 (エネルギーが 1–100keV) の存在と非常に相関が良いことが観測により示されている。本研究では、このような高速電子による強い電流不安定性の非線形発展によって、<sup>3</sup>He 粒子への選択的なエネルギー輸送が引き起こされることを粒子シミュレーションによって示し、その加速の機構を解明した。また、<sup>3</sup>He が加速されるための条件と加速された<sup>3</sup>He 粒子のエネルギーを、理論と数値計算によって詳しく調べた。

主成分を H、副成分を<sup>4</sup>He と<sup>3</sup>He (ただし、<sup>3</sup>He は<sup>4</sup>He に比べてずっと存在量が少ない) とするプラズマ中の強い電流不安定性について、2次元静電粒子コードを用いてシミュレーションを行った。図1に示すように、初期には線形理論で最も不安定な Buneman 波が成長するが直ぐ飽和する。一方、線形理論で安定な H のサイクロトロン波は、遅れて不安定化し、最終的には大振幅にまで成長している。特に、H サイクロトロン波は、電子イオンの上昇後に不安定化している。これらの現象は、電子捕捉を介した電子の速度分布関数  $f_e(v_{||})$  の急激な変化によるものである。図2は、H サイクロトロン波の分散関係とパワースペクトルを示したものである。 $\omega = 2 \cdot \Omega_{3He}$  ( $\Omega_{3He}$  のサイクロ

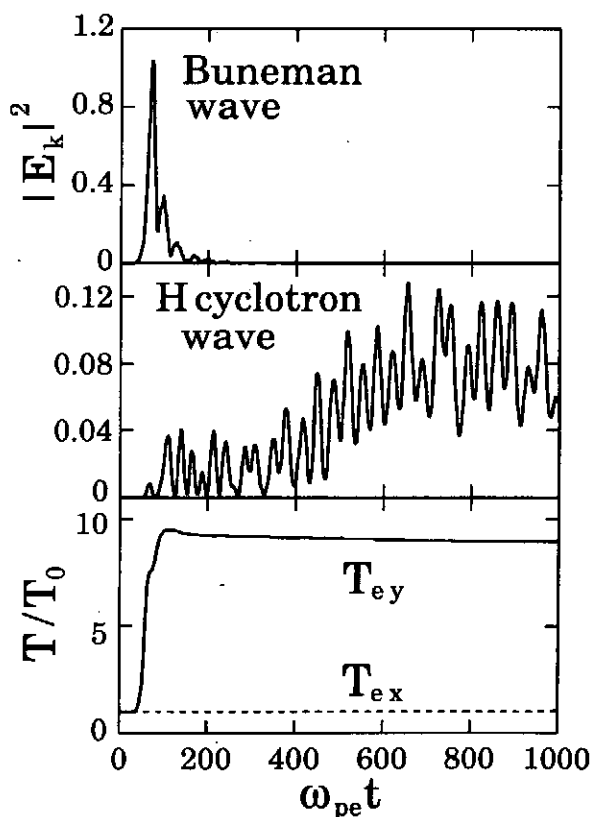


図1 Buneman 波、Hcyclotron 波、電子温度 ( $T_{ey}$  は磁場平行方向、 $T_{ex}$  は磁場垂直方向) の時間変化



トロン周波数) 付近の波が最も大振幅となっている。この波によって、図3に示すように、 $^3\text{He}$  粒子が選択的に加速される。

次に、 $\omega = 2 \Omega_{3\text{He}}$  の波が大振幅となる条件を、理論的に調べた。図4はその結果であり、イオンの温度を 100eV とすると、初期の高速電子のエネルギーが数 KeV 以上であれば、 $\omega = 2 \Omega_{3\text{He}}$  の付近の波が最も大きな成長率を持つことを示している。この結果は、磁場の強さや背景のプラズマ密度にはほとんど依存しないことも明らかになっている。

さらに、その波の中の  $^3\text{He}$  粒子の軌道を解析した結果、数 10 KeV の高エネルギー電子による不安定性の非線形発展によって、MeV オーダーのエネルギーをもつ  $^3\text{He}$  粒子が多数生成されることが明らかになった。このエネルギーは、 $^3\text{He}$  過剰現象で観測されている  $^3\text{He}$  粒子のエネルギーと一致する。

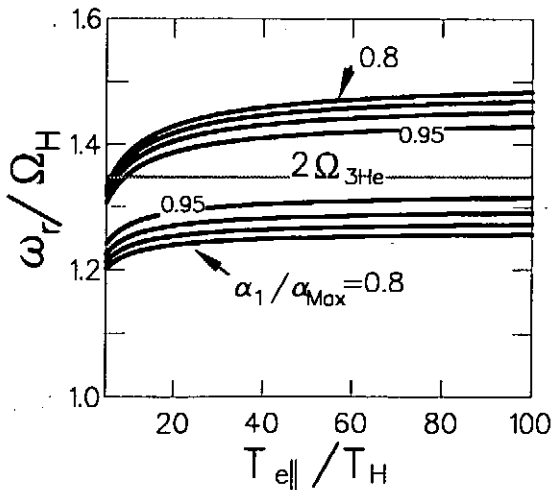


図4 最大成長率を持つ H サイクロトロン波の振動数

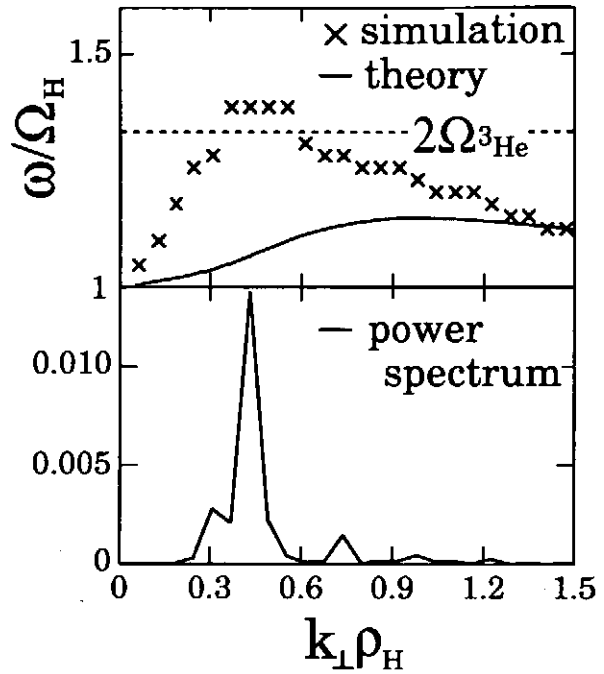


図2 H cyclotron 波の分散関係とスペクトル

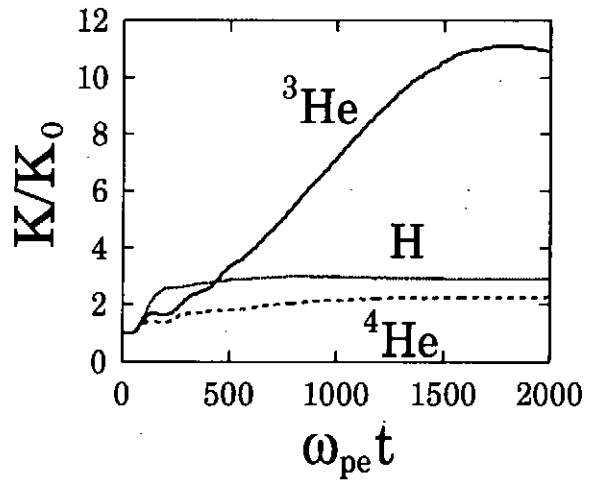


図3 イオンのエネルギーの時間変化

# 衝撃波多段加速の相対論的効果と統計的性質

名古屋大学大学院理学研究科

宇佐見 俊介, 大澤 幸治

宇宙線は様々な場所で生成されている。宇宙線加速の機構は、従来は多くの場合、Fermi加速のような統計的モデルで説明しようとされてきた。しかし、統計的な加速モデルに対する、実際の実験や自己無撞着なシミュレーションによる実証はまだない。

我々は、磁気音波による、非統計的な加速機構を研究している。大振幅の磁気音波は衝撃波の形で伝播する。磁気音波衝撃波に熱的な水素イオン、重イオン、電子が遭遇した場合、それぞれ異なる非統計的な機構によって高エネルギーに加速されることが、最近の研究で分かってきた。そして現在、我々は、非熱的な高速イオンが磁気音波衝撃波に遭遇した場合、さらに高エネルギーに加速されるかどうかを調べている。

外部磁場に対して斜めに伝播する衝撃波を考える。高速イオンの中には、衝撃波上流から一旦衝撃波内部に突入しても、磁場による旋回運動のため再び上流に脱出するものが存在する。図1に斜め衝撃波の電磁場とその高速イオンの軌道を表した。このような軌道のイオンは、衝撃波内部において進行方向が横電場とほぼ同じ向きである。そのため、この部分で加速を受けて磁場に垂直な運動量成分  $p_{\perp}$  が増大する。それだけでなく、イオンが衝撃波に入るとき ( $t=t_{in}$ ) と出るとき ( $t=t_{out}$ ) に、磁場の効果から、運動量の平行成分  $p_{\parallel}$  が増大する。

斜め衝撃波では、高速イオンが何度も加速される (多段加速) 現象が起こる。外部磁場に平行なイオンの速度を  $v_{0\parallel}$  とすると、 $v_{0\parallel} \cos\theta_0$  は粒子の衝撃波伝播方向速度の時間平均値である (図1参照)。よって、 $v_{0\parallel} \cos\theta_0 \sim v_{sh}$  ( $v_{sh}$  は衝撃波の伝播速度) を満たすイオンは衝撃波と共に動き、同じ衝撃波による多段加速を受けることができる。図2は多段加速を受けるイオンの軌道を表したものである。イオンは磁力線に沿って進みながら Larmor 運動をしている。実線は衝撃波内部での軌道であり、この部分でイオンは横電場による加速を受けて  $p_{\perp}$  が増大していく。黒丸はイオンが衝撃波に出入りする点であり、ここで磁場の効果から  $p_{\parallel}$  が (すなわち  $v_{\parallel}$  も) 増大していく。このことから、ある時刻に  $v_{0\parallel} \cos\theta_0 > v_{sh}$  となり、イオンは衝撃波の前方に飛び去り加速は終了する[1]。

衝撃波の伝播速度が  $v_{sh} \sim c \cos\theta_0$  である場合を考える。粒子の速度は光速  $c$  で抑えられるので、イオンは衝撃波伝播方向に  $c \cos\theta_0$  を超える速度で進むことはできない。よって、「 $v_{sh} \sim c \cos\theta_0$  であるならば、一旦  $v_{0\parallel} \cos\theta_0 \sim v_{sh}$  を満たして衝撃波と共に動き始めたイオンは、衝撃波の前方に飛び去ることができず、非常に長い時間にわたって多段加速を受ける (長時間多段加速)」ということが予測され、実際に粒子シミュレーションでも観測された[2]。

粒子シミュレーションよりも長時間の観測をするため、テスト粒子シミュレーションを行った。これは、粒子シミュレーションで計算された衝撃波の電磁場を用い、その中での高速イオンの運動方程式を解いて軌道を追跡する手法である。図3は  $\theta_0 = 61^\circ$  ( $\cos\theta_0 = 0.4848$ )、 $v_{sh} = 0.4800c$  である衝撃波によって加速されるイオン(H)の  $\gamma$  の時間変化を表す。この例では、イオンは同じ衝撃波によって42回加速を受け、Lorentz 因子  $\gamma$  が4から160以上にまで増大した[3]。

さらに、我々はこの加速機構に関する多数粒子の統計的性質について研究を進めている。具体的には、衝撃波上流に 5000 個の高速イオン粒子を等方分布しておき、衝撃波との遭遇によって分布がどう変化するかを観測した。図 4 は運動量空間における粒子の分布を表す。衝撃波と遭遇後、ほとんど相互作用せず下流に通過する粒子と、多段加速を受ける粒子とに、明確に分かれている。図中の点線は、 $v_{0\parallel} \cos\theta_0 = v_{sh}$  を示す。多段加速を受ける粒子は、ほぼこの線に沿って広がっていくことが分かる。図 5 は Lorentz 因子の個数分布を表す。全ての高速イオンの  $\gamma$  の初期値を 4 と設定したが、多段加速を受けることにより、時間の経過と共に、高エネルギーの粒子が増加していく。シミュレーション終了時( $\Omega_{H0}t=9000$ )で、 $\gamma > 50$  以上まで加速された粒子が全高速イオンの数%存在することを確認した。

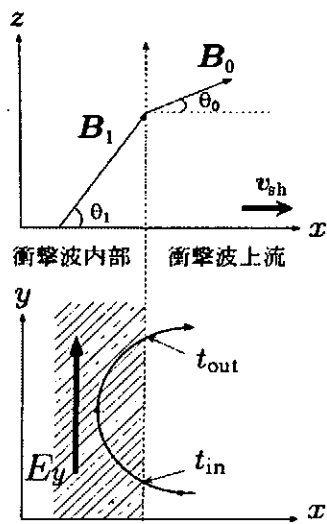


図 1: 斜め衝撃波の電磁場とイオンの軌道。

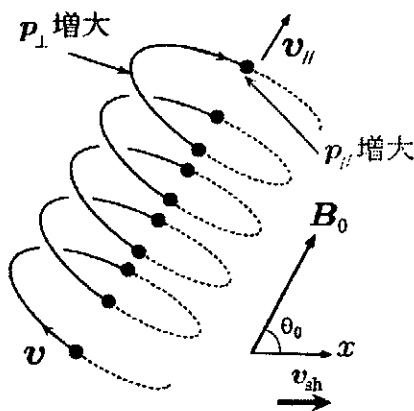


図 2: 多段加速を受けるイオンの軌道。

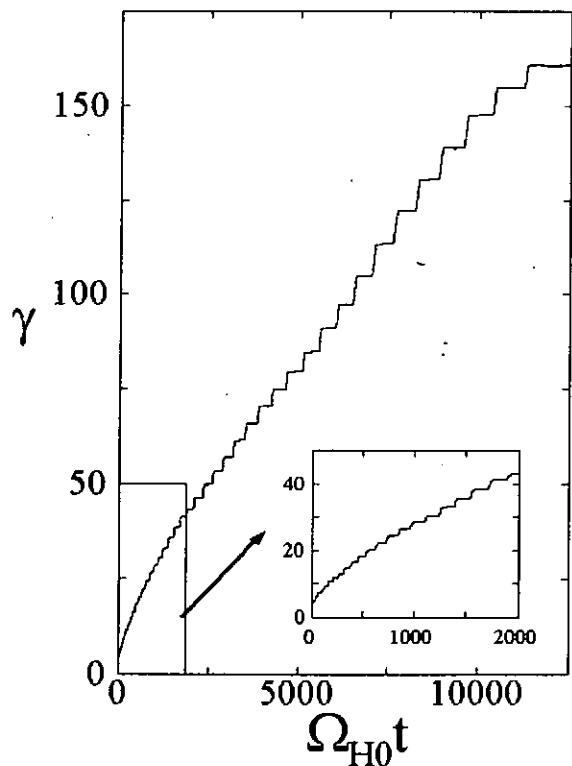


図 3: 長時間多段加速を受けるイオンの Lorentz 因子の時間変化。

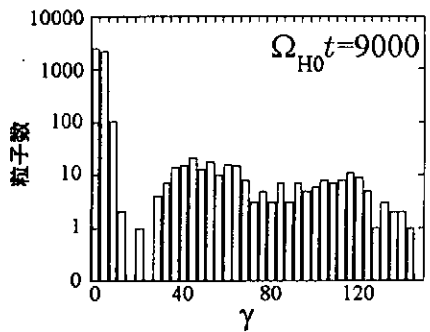
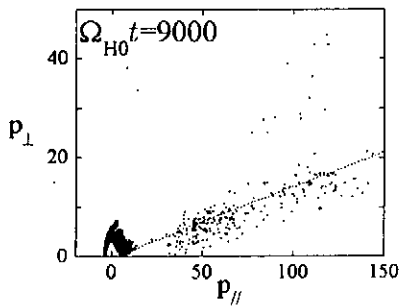
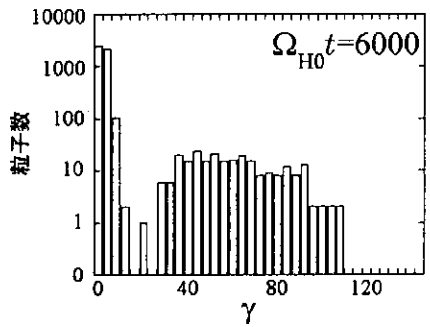
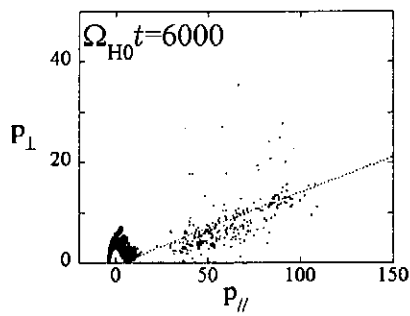
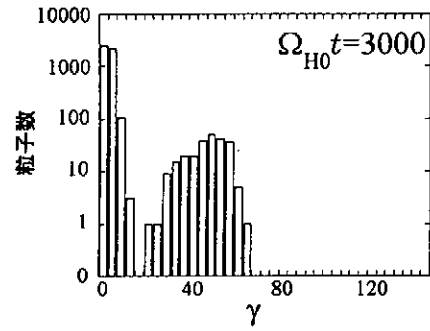
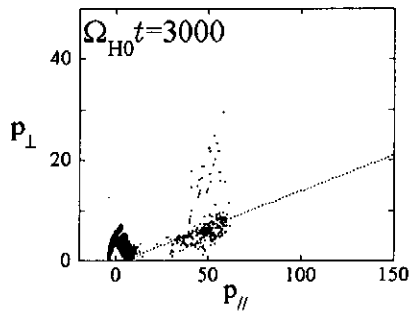
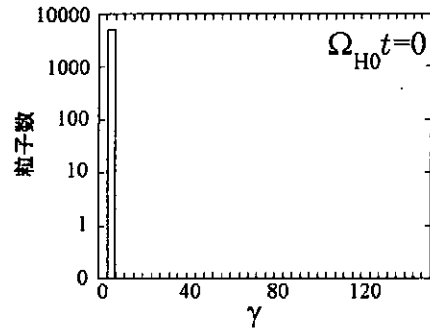
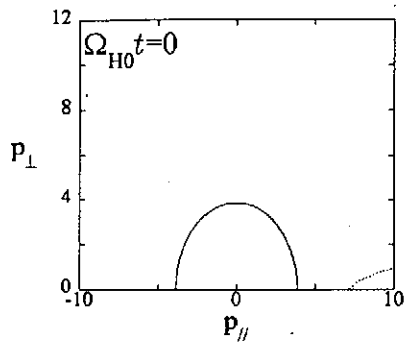


図 4: 運動量空間における粒子分布。  
運動量は  $m_H c$  で規格化してある。

図 5: Lorentz 因子の個数分布。

- [1] T. Masaki, H. Hasegawa, and Y. Ohsawa, Phys. Plasmas 7, 529 (2000)
- [2] S. Usami, H. Hasegawa, and Y. Ohsawa, Phys. Plasmas 8, 2666 (2001)
- [3] S. Usami and Y. Ohsawa, Phys. Plasmas 9, 1069 (2002)

# Complexity in a High Intensity Laser-Plasma Interaction

Lj. Nikolić<sup>1</sup>, S. Ishiguro<sup>2</sup>, M. M. Škorić<sup>3</sup>, and T. Sato<sup>4</sup>

<sup>1</sup>The Graduate University for Advanced Studies, National Institute for Fusion Science, 322-6 Oroshi-cho, Toki-shi 509-5292, Japan

<sup>2</sup>Theory and Computer Simulation Center, National Institute for Fusion Science, Japan

<sup>3</sup>Vinča Institute of Nuclear Sciences, Yugoslavia

<sup>4</sup>Earth Simulator Center, JAMSTEC, Japan

## Abstract

Propagation of a laser light through regions of an underdense plasma is an active research topic in laser fusion. In particular, a large effort has been invested in studies of stimulated Raman scattering (SRS) which can reflect laser energy and produce energetic particles to preheat a fusion energy target. By particle-in-cell simulations of an underdense electron-plasma, we have found, apart from the standard SRS, a strong backscattering near the electron plasma frequency at densities beyond the quarter critical. This novel instability represents a three-wave resonant decay of the incident laser light into a standing backscattered wave and a slow trapped electron-acoustic wave ( $\omega < \omega_p$ ).

## 1 Introduction

A general issue in laser fusion that has been of considerable interest in past decades is growth of instabilities in underdense plasmas. Stimulated Raman scattering (SRS) is known as major processes that can bring high reflectivity and undesirable target preheat to prevent efficient compression of the fuel. Although much effort has been devoted to this subject, observations and theoretical models are rarely in good agreement.

Recently, a new type of stimulated scattering on the so-called, electron-acoustic wave (EAW) was proposed by Montgomery et al. [1], to reinterpret underdense plasma data from the Trident laser facility. It was shown, that among electronic instabilities, stimulated scattering of laser light from a trapped electron-acoustic wave (SEAS) ( $\omega < \omega_p$ ) can possibly explain anomalous backscatter data previously attributed to stimulated Raman back-scattering (B-SRS) from unrealistically low plasma density. In Maxwellian plasmas, a slow linear electron-acoustic mode is strongly Landau-damped; however, at large EAW amplitudes, electron trapping with a small dissipation, can support undamped travelling modes (BGK-alike) [2]. In the experiments reported, the SEAS to SRS signal ratio was smaller than  $10^{-3}$ . However we find plasma conditions such that SEAS can dominate over

B-SRS [3]. This novel instability is absent from a classical theory of laser-parametric instabilities. A parametric excitation of SEAS instability, can be explained by a three-wave resonant decay of the incident laser light into a standing backscattered wave and a slow trapped electron-acoustic wave ( $\omega < \omega_p$ ) [3].

## 2 Simulation Model

To investigate stimulated laser scattering in an underdense plasma, one-dimensional particle-in-cell simulations were performed with an electromagnetic relativistic code. A plasma layer was placed in vacuum with more than 50 electrons/cell, while ions were kept immobile to create a neutralizing background. For energetic electrons and electromagnetic waves that reach system boundaries, two extra damping regions at the system ends were introduced.

## 3 Simulation Results

To illustrate the plasma response to a step-function, linearly-polarized laser pulse with an intensity  $\beta = eE_0/(mc\omega_0) = 0.5$  ( $E_0$  is the electric field), in Figure 1 the snapshot of electromagnetic (EM) and electrostatic (ES) waves for  $t\omega_0 = 89$  (left) and the snapshot of longitudinal velocity  $v_x/c$  versus position for  $t\omega_0 = 224$  (right) are shown for an initially uniform plasma layer of length  $L = 50c/\omega_0$  ( $\omega_0$  is the laser frequency) with the electron temperature  $T = 500\text{eV}$  and plasma density  $n = 0.7n_{cr}$  ( $n_{cr} = n(\omega_0/\omega_p)^2$  is the critical density;  $\omega_p = (ne^2/(\epsilon_0 m \gamma))^{1/2}$  is the electron plasma frequency and  $\gamma$  is the relativistic Lorentz factor).

As one can see, intense laser light ( $\omega_0, k_0$ ) drives an instability with a high amplitude ES wave that efficiently heats the plasma. Furthermore, the generated trapped ES wave is characterized by the wave number  $k \approx k_0$ .

To clarify the nature of the instability in Figure 2, EM and ES spectra in the plasma layer (density and length are  $n = 0.4n_{cr}$  and  $L = 40c/\omega_0$ , respectively, the longitudinal thermal velocity is  $v_t/c = 0.2$  and the laser strength is  $\beta = 0.3$ ) are shown. The time interval  $t\omega_0 = 0 - 1057$  covers an early phase of the instability, and the time interval  $t\omega_0 = 1291 - 2348$  includes a fully developed SEAS instability stage. The scattered EM wave ( $\omega_s, k_s$ ) grows at the electron plasma frequency  $\omega_p \approx 0.6\omega_0$  (the laser pump line at  $\omega/\omega_0 = 1$  is not shown), while corresponding electron-acoustic ES wave ( $\omega_a, k_a$ ) grows at  $\omega_0 - \omega_p \approx 0.4\omega_0 < \omega_p$ . Note that apart from ES noise around a natural plasma mode ( $\omega_p \approx 0.6\omega_0$ ), ponderomotively driven non-resonant ES mode is also present at  $\omega = 2\omega_0$  and  $k = 2k_0$ .

Through many of our simulations in a broad range of plasma densities ( $n > 0.25n_{cr}$ ) and laser strengths, it was confirmed that the main characteristic of SEAS instability is that the backscattered wave is driven near critical, i.e.  $\omega_s \approx \omega_p$  which implies  $k_s \approx 0$  and  $V_s \approx 0$  ( $V_s \approx 0$  is the group velocity of the scattered wave). Therefore, the backscattered wave is a slowly propagating (standing) EM wave such that the frequency and wave number of EAW match a 3-wave resonance, as  $\omega_a = \omega_0 - \omega_s \approx \omega_0 - \omega_p$  and  $k_a = k_0 - k_s \approx k_0$ . Indeed, in an early SEAS phase, observed narrow spectrum readily obeys the above frequency (see Fig. 2) and wave number (see Fig. 1) matching conditions.

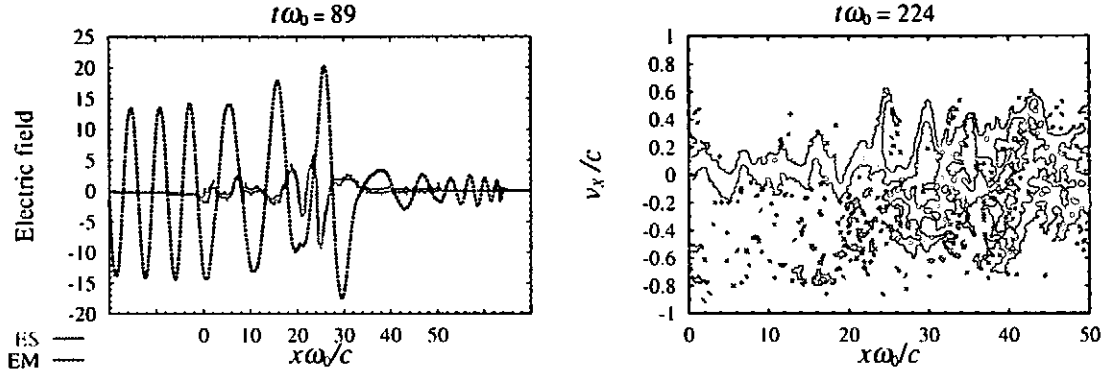


Figure 1: (left) Snapshot  $t\omega_0 = 89$  of EM and ES fields versus position for plasma layer ( $n = 0.7n_{cr}$ ,  $L = 50c/\omega_0$ ,  $T = 500\text{eV}$ ,  $\beta = 0.5$ ). (right) Snapshot  $t\omega_0 = 224$  of the longitudinal electron velocity versus position.

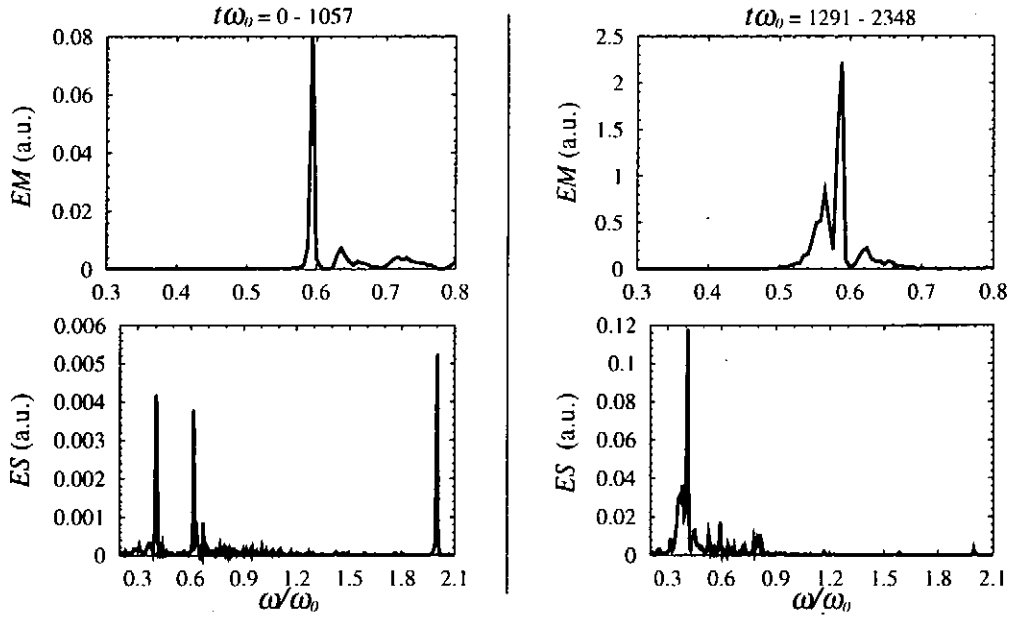


Figure 2: Spectra of electromagnetic (top) and electrostatic (bottom) waves in the plasma layer ( $n = 0.4n_{cr}$ ,  $L = 40c/\omega_0$ ,  $\beta = 0.3$ ) for time intervals  $t\omega_0 = 0 - 1057$  and  $t\omega_0 = 1291 - 2348$ . The initial thermal velocity is  $v_t/c = 0.2$ .

## 4 Conclusions

Although there has been a significant effort to understand a complicated picture of underdense plasma instabilities, in most cases obtained results, including those presented here, show a variety of phenomena that can lead to an unexpectedly large and anomalous plasma response. It was shown, that an intense laser driven plasma can efficiently generate trapped electron-acoustic ES waves. The possibility of exciting such intense ES waves deserves future attention.

## References

- [1] D. S. Montgomery *et al.*, *Recent Trident single hot spot experiments: Evidence for kinetic effects, and observation of Langmuir decay instability cascade*, Phys. Plasmas **9**, 2311 (2002).
- [2] H. A. Rose and D. A. Russell, *A self-consistent trapping model of driven electron plasma waves and limits on stimulated Raman scatter*, Phys. Plasmas **8**, 4784 (2001).
- [3] Lj. Nikolić *et al.*, *Stimulated electron-acoustic-wave scattering in a laser plasma*, Phys. Rev. E **66**, 036404 (2002).



# 太陽フレアにおける磁気リコネクション・ジェットの内外部衝撃波

田沼俊一、柴田一成

京都大学大学院 理学研究科 附属天文台

## イントロダクション-太陽フレアにおける粒子加速

太陽フレアは磁気リコネクションによって発生すると考えられている。その際、短時間のうちに磁気エネルギーが解放され、高温ガスや高エネルギー粒子が作り出される。そして、それらが放射する X 線や  $\gamma$  線は、Yohkoh や RHESSI などの太陽観測衛星によって観測されている。

ところで、太陽フレアの原因である速いリコネクションは、リコネクションジェットの両側にスローショックを伴う。さらにジェットは太陽表面から膨らむ磁気ループと衝突してファストショックを作る。衛星によって観測される高エネルギー粒子は、このようにしてできるスローショックやファストショックで作られているのではないかと考えられているが、太陽における粒子加速を完全に説明する理論的なモデルは、まだ作られていない。例えば、Tsuneta & Naito (1998) は、ループトップのファストショックが斜め衝撃波になって粒子加速をするのではないかと提案した。すると、ガスはスローショックであらかじめ 10-20 MK に加熱されれば、その後 1 次のフェルミ加速によって 0.3-0.6 秒の間に 20-100 keV にまで加速可能である。しかし、それでもすべての太陽フレアの高エネルギー粒子の生成を説明しきれないわけではない。

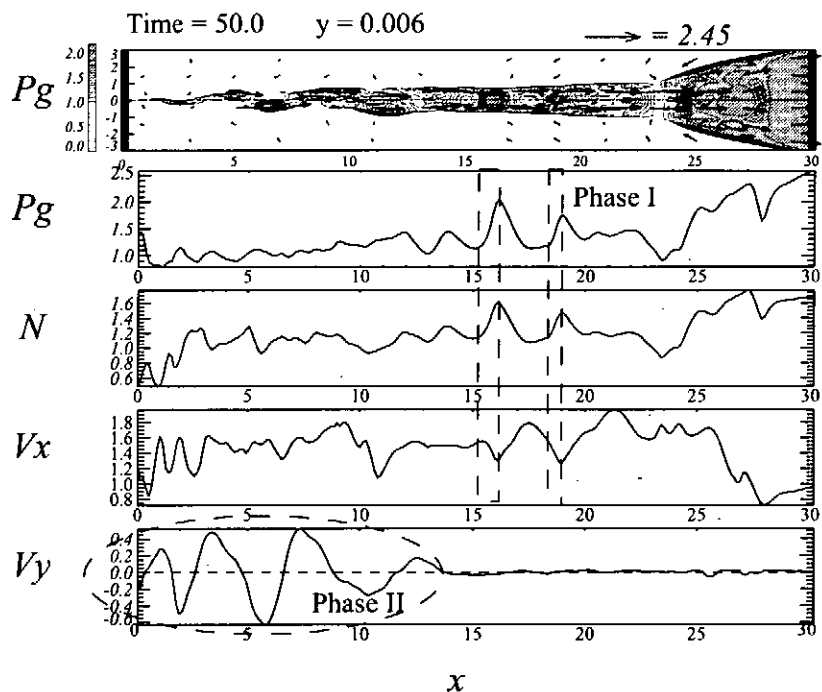
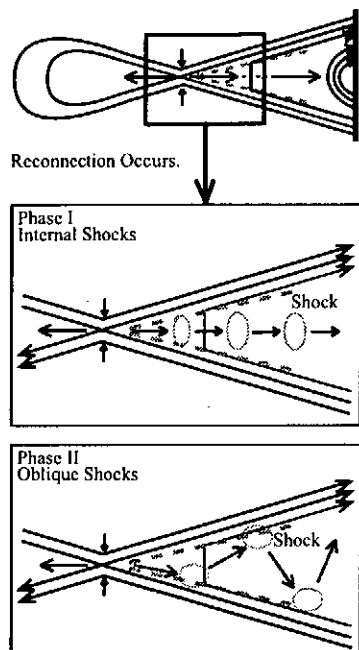
そこで我々は、ジェットがループトップのファストショックにたどり着く前に、ジェットの内外部で衝撃波を作る（その結果粒子加速が起こる）のではないかと考え、高分解の 2 次元 MHD シミュレーションを行なって調べた。

## 数値シミュレーション

初期条件として  $B_x = B_0 \tanh(y/1.0)$ ,  $B_z = 0$ ,  $p_g = p_0 + (B_0^2/8\pi)[1 - \tanh(z/0.5)^2]$  で与えられる Harris 型の電流シートを作った。プラズマ  $\beta$  (= ガス圧/磁気圧) は、 $\beta = 8\pi p_0/B_0^2 = 0.2$  ( $|z| \gg 1$ )。全圧 (ガス圧+磁気圧)・温度・音速は全体で一様、ガス圧・密度・磁場強度は電流シートの外側で一様である。計算領域は  $(L_x, L_z) = (208.0, 20.8)$ 、メッシュサイズは  $(\Delta x, \Delta z) = (0.13, 0.013)$  (一様メッシュ)、メッシュ数は、 $(N_x, N_z) = (1600, 1600)$  とした。境界は、上下が対象境界、左右が周期境界である。本研究では、計算領域を充分広く取ることで、境界の影響を防いでいる。この計算では異常抵抗モデルを仮定し、ドリフト速度 ( $v_d = |j|/\rho$ ) が閾値  $v_c$  を越えると、その部分に局所的に大きな電気抵抗が働くようにしてある。具体的には、 $\eta = 0$  (if  $v_d < v_c$ ),  $\eta = \alpha(v_d/v_c - 1)^2$  (if  $v_d \geq v_c$ ) という式で与え、 $\eta_{max} = 1$  を越えないようにした。パラメータは、 $v_c = 100$ ,  $\alpha = 10$  である。磁気レイノルズ数は、 $R_m = L_x V_A/\eta_{max} \sim 500$  である。そして初期摂動として、電流シートの中心部分に短時間だけ電気抵抗を与えた。

その結果、電流シートは、(i) テアリング不安定性による電流シート thinning、(ii) その非線形段階における Sweet-Parker リコネクション、(iii) 細長くなった電流シート中での再度のテアリング不安定性と、プラズモイドの発生・噴出、(iv) プラズモイド噴出直後の異常抵抗の励起と、Petschek リコネクションの開始、という順に変化した (Tanuma et al. 1999, 2001)。

そしてこのとき、ジェットに、以下の 2 種類の内部衝撃波が発生することが分かった。(i) 最初に薄い Sweet-Parker 電流シートで、再度のテアリング不安定性が発生。その結果作られる小さなプラズモイドがジェットとして噴出されることで、ほぼ等間隔に内部衝撃波が発生。(ii) その後散逸領域から飛ばされるジェットが振動を開始。その結果、スローショックに衝突してさらに多重衝撃波が発生。



左図：シミュレーション結果のフローチャート。(Phase I) 速いリコネクションが発生すると、まずは再度のテアリング不安定性に伴う内部衝撃波が発生する。(Phase II) そしてその後、リコネクションジェットが振動を始めて、電流シートの両側のスローショックに繰り返し衝突することで、いくつものファストショックを作る。右図：計算結果（密度分布）と、断面図（ガス圧・密度・速度 2 成分）。断面図から、2 種類のファストショックが作られていることが分かる（ $x = 0$  付近からジェットが噴出する）。

## 議論

本研究の結果、リコネクションジェットに内部衝撃波が発生することが明らかになった (Tanuma et al. [2001] などにも現れているが、初期摂動として電流シートの外側に点源爆発をひとつ置いている上、今回よりメッシュが粗い)。このようなリコネクションフローの振動は、これまでもハイブリッドシミュレーション (Arzner & Scholer 2001) や high- $\beta$ での MHD シミュレーション (Biskamp et al. 1998) の結果にも現れている。しかし、ジェットの振動やショックの発生の原因に関してはまだ分かっておらず、今後詳しく調べなくてはならない。

ここで述べたような内部衝撃波が実際の太陽でも発生しているとすれば、太陽における粒子加速に効くはずであり、この結果は Tsuneta & Naito (1998) などの提案を補うものになる。また、このようなリコネクションジェットの内部衝撃波は、太陽と同様にリコネクションが起こっている地球磁気圏の粒子加速にも効くはずである。

## 参考文献

- ・ Arzner, K. & Scholer, M. 2001, *J. Geophys. Res.*, **106**, 3827
- ・ Biskamp, T., Schwarz, E. & Zeiler, A. 1998, *Phys. Plasmas*, **5**, 2485
- ・ Tanuma, S. et al. 1999, *Publ. Astron. Soc. Japan*, **51**, 161
- ・ Tanuma, S. et al. 2001, *Astrophys. J.*, **551**, 332
- ・ Tsuneta, S. & Naito, T. 1998, *Astrophys. J.*, **495**, 67

### 3次元開放系におけるプラズマ不安定性と無衝突磁気リコネクション

堀内利得  
核融合科学研究所

#### 1. はじめに

無衝突プラズマから成る電流層での磁気リコネクション、即ち、無衝突リコネクションを誘発する機構として、これまで2つの異なる物理過程が考えられていた。

1つは波粒子相互作用に起因する異常抵抗の発生に関するもの、他の1つはプラズマを構成するミクロな粒子の性質に着目した粒子運動論的效果に関するものである。

異常抵抗に関する2次元粒子シミュレーション研究 [1]により、電流層中に低域混成ドリフト不安定性と低周波電磁不安定性の2種類のプラズマ不安定性が発生することが明らかにされた。この低周波電磁不安定性はドリフトキンク不安定性[2]とも呼ばれ、イオンラーモア半径程度の狭い領域に流れる電流によって磁気中性面近傍で駆動され、平衡電流に沿った方向に空間構造を作り出す。一方、低域混成ドリフト波は電流層の周辺領域で励起されるが、磁気中性面近傍の高ベータ領域では減衰するために異常抵抗の原因とは成り得ないことが示された。

外部駆動電場が存在する場合の2次元粒子シミュレーション[3]により、磁気リコネクションが、イオンと電子の2種類の粒子運動論的效果に対応して、電流層の2段階構造変化を伴って駆動されることが明らかにされた。即ち、初期の遅いリコネクション位相ではイオンの運動論効果が支配的なイオン電流層が、その後の早いリコネクション位相では電子の運動論的效果が支配的な電子電流層が形成される。

一般に、プラズマ不安定性を通じ磁気中性面に発生した電場は、平衡電流に垂直な平面（リコネクション面）内の磁場構造に変化をもたらす。前者の2次元シミュレーションでは、磁力線方向の空間構造が考慮されていないため、この過程は記述できない。一方、後者のシミュレーションでは、平衡電流に沿った方向の空間構造を解いていないため、平衡電流方向に進行する波と荷電粒子との相互作用に起因する異常抵抗の効果が記述されていない。本研究では、無衝突プラズマで磁気リコネクションを誘発する2つの過程、即ち、波粒子相互作用に起因する異常抵抗の発生及び粒子運動論的效果が混在する系のダイナミカルな時間発展を解析する目的として、3次元電磁粒子シミュレーションを実行した[4]。

#### 2. シミュレーション結果

初期条件としては、2次元シミュレーションと同様にHarris型の反平行の磁場構造を持つ平衡配位を採用する。境界条件として、下記のテーブルに示した3種類のモデルを構築し、シミュレーションの実行により磁気リコネクションに及ぼす境界条件の影響を調べた。ここで、x方向（平衡磁場の方向）の境界が下流境界、y方

向（初期配位の空間依存性の方向）の境界が上流境界とし、 $z$ 方向（平衡電流の方向）の境界ではすべての場合、周期条件を仮定している。印加条件では、磁力線に垂直方向に最大値が $E_0$ で与えられる駆動電場の存在 [3]を仮定した。

モデル	上流境界	下流境界
A	自由境界条件	周期条件
B	印加条件	周期条件
C	印加条件	自由境界

また、粒子は $E \times B$ ドリフト速度で境界を通して系内に供給される。用いたシミュレーション・コードは、粒子をPIC法よって記述された超粒子で、時間積分に関して陽解法を用いた3次元電磁粒子コードである[4]。

### A. 異常抵抗の発生

ここでは、モデルAの結果について述べる。2次元シミュレーションと同様に、3次元空間においても2つのプラズマ不安定性、即ち、低域混成ドリフト不安定性およびドリフトキンク不安定性が電流層で励起されるのを観測した。比較的早い時期に、低域混成ドリフトモードが空間勾配の急な周辺領域で成長し始める。このモードが成長するにつれ、周辺領域の電流分布が平坦化されていく。その結果、モード自身も安定化されることになる（非線形飽和）。他方、このモードの非線形成長は、周辺領域を平坦化するばかりでなく、電流層の内部を圧縮し、磁気中性線（ $y$ 軸の中央）近傍に、より急峻な電流分布を作り出す。初期にイオンのラーモア半径と同程度であった電流層の半値幅がイオンのラーモア半径より小さくなることにより、ドリフトキンクモードが不安定となり、成長を始める。即ち、このドリフトキンクモードは、その成長率が電流層の厚さに強い依存性を持つため、より急峻な電流層が形成される非線形飽和位相において、急激に発達し出す。このモードの成長は、電流層の中心部を攪乱し、平衡電流分布を変形する。その結果、磁気中性面に平衡電流方向の電場成分を発生させ、磁気リコネクションを引き起こす[4]。即ち、この波粒子相互作用を通じて異常抵抗が発生し、無衝突磁気リコネクションが発生したことを意味する。

### B. 駆動電場と粒子運動論効果

次に、外部駆動電場（ $E_0=0.02$ ）が存在する場合（モデルB）について議論する。このシミュレーションでは、電流層の厚さをイオンの運動論効果の空間スケール（ラーモア半径）程度に採っている。そのため、シミュレーションの初期から、イオンの運動論効果により、外部から与えられて電場が電流層の内部に浸透していく。磁

気中性面に到達した時点で磁気リコネクションが駆動される。このシミュレーションで興味深いのは、ドリフトキンクモード（実線）が駆動される前に、リコネクション電場がイオンの運動論効果を通じて励起され、その結果、x軸方向にリコネクションに伴う空間構造の変化が生み出されている点である。即ち、駆動電場が存在する場合は、駆動電場がない場合と異なり、異常抵抗による電場が発生する前に、イオンの運動論効果を通じて、無衝突磁気リコネクションが誘発されている。

### C. 磁気島の発生とキンク不安定性

リコネクション流速の下流領域での振る舞いを調べるために、自由境界モデル（モデルc）を構築した。磁気リコネクションの発達の結果、下流に向かう高速のプラズマ流が生み出される。この高速プラズマ流は、リコネクション点近傍の急峻な電流分布を担っているプラズマを運び去るため、電流分布が平坦化され、ドリフトキンクモードが再び安定化される（右図の中央）。一方、この運び出されたプラズマは、2次元開放系シミュレーション[5]と同様に、下流領域に磁気島構造を形成する。時間の経過とともに、磁気島内部に大量の電流が集中してくるため、磁気島構造がキンク不安定となる（右図）。また、リコネクション領域の磁場構造も、これらプラズマ不安定性のため、3次的に複雑な様相を呈している。

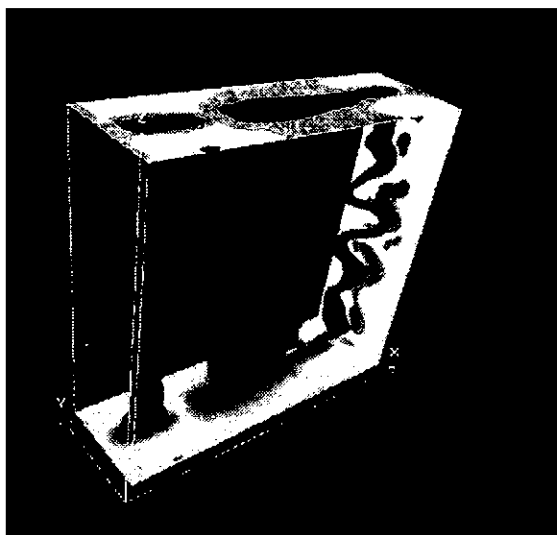


図1. リコネクション磁場成分の絶対値。3次元シミュレーション空間内での磁場構造が示している。磁場の弱い領域が青で表示されている。

### 参考文献

- [1] M. Ozaki, T. Sato, R. Horiuchi, et al, Phys. Plasmas, **3**, 2265(1996).
- [2] W. Daughton, J. Geophys. Res., **103**, 29429(1998).
- [3] R. Horiuchi and T. Sato, Phys. Plasmas, **1**, 3587(1994) ; **4**, 277(1997).
- [4] R. Horiuchi and T. Sato, Plasma Physics and Controlled Fusion, **41**, A477(1999); R. Horiuchi and T. Sato, Phys. Plasmas, **6**, 4565(1999).
- [5] W. Pei, R. Horiuchi and T. Sato, Phys. Rev. Lett. **87** 235003 (2001).

# 弱衝突性イオン温度勾配型乱流の数値シミュレーション

渡邊智彦、洲鎌英雄

核融合科学研究所／総合研究大学院大学

(岐阜県土岐市下石町 322-6)

[tomo@nifs.ac.jp](mailto:tomo@nifs.ac.jp)

磁化プラズマにおける粒子及び熱の乱流輸送機構の解明とその予測は、磁場閉じ込め核融合研究において、当初からの主要な中心課題の一つであり、現在も継続的に研究が進められている。一般に、そのプラズマ乱流による輸送は、粒子間衝突に起因する輸送係数を遥かに上回り、異常輸送と呼ばれている。数 KeV の温度を持つ高温プラズマでは、衝突周波数が非常に小さく、構成粒子である電子・イオンの磁力線に平行方向の平均自由行程は装置サイズの百倍から千倍にもなる。そのため種々の揺動に伴い、Maxwell 分布から大きくずれた(1 体)速度分布関数の揺らぎが生じ得る。異常輸送を引き起こすプラズマ乱流も例外ではなく、その解析には粒子運動論的なアプローチが本質的である。局所的に熱平衡状態にあり、Navier-Stokes 方程式で記述される流体乱流による輸送も十分難しい研究対象であるが、このことは異常輸送機構の解析を一層困難なものにしている。

1990 年代以降、磁化プラズマ乱流輸送に対し、運動論的シミュレーションを用いた解析が盛んに行われるようになってきた。そこでは、粒子モデルや運動論的效果を取り入れた流体モデルが主流であった。一方、我々は最近、1 体速度分布関数を記述するジャイロ運動論方程式を多次元の位相空間中で直接解くシミュレーションを行い、無衝突磁化プラズマ乱流の基本的な性質に関する研究を進めてきた [1]。その結果、一定の温度勾配によって駆動される無衝突プラズマ乱流においては、位相混合により速度空間内に分布関数の細かな揺動が生成され続け、その生成率と定常的な乱流輸送が釣り合う「準定常状態」が実現され得ることが明らかになってきた。これは衝突周波数が 0 となる極限におけるプラズマ乱流の性質に関わる問題であるが、これが現実的な意味を持つには、衝突周波数を徐々に小さくしていった場合、その結果が無衝突の場合と一致することが必要である。本研究では、様々な衝突周波数に対して同様の乱流輸送シミュレーションを行い、輸送係数、分布関数のスペクトルなどを調べ、無衝突の結果と比較した。

ここで対象とするのは、一様な磁場に対し垂直方向にイオン温度勾配を与えた局所的な 2 次元系である。密度・温度勾配は一定とし、また電子は静電ポテンシャル揺動に断熱的に応答するものとして、イオン分布関数の揺動成分についての方程式を周期境界条件のもとで数値的に解く。衝突項として速度空間内での拡散項を含む Lenard-Bernstein モデルを用いる。様々な衝突周波数に対して得られた乱流輸送係数を図 1 にまとめた。ここで破線は上述の無衝突乱流のシミュレーションによって得られた結果である。図を見ると、衝突周

波数が小さくなるのに応じて、輸送係数は無衝突乱流の場合に漸近することが分かる。この結果は、無衝突プラズマ乱流シミュレーションで得られた「準定常状態」が、衝突周波数0の極限として有意なものであることを支持している。

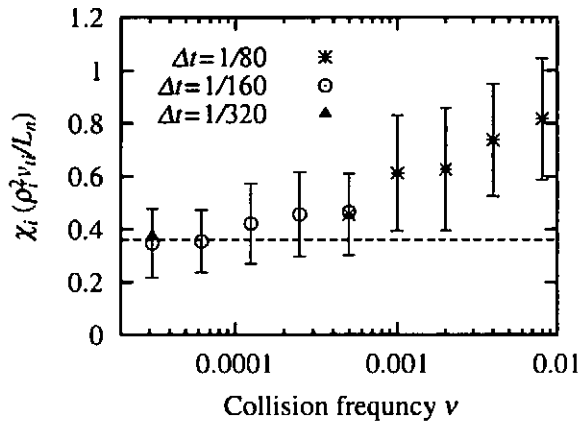


図 1：輸送係数の衝突周波数依存性

図 2 には、様々な衝突周波数の場合に得られたイオン速度分布関数の速度空間スペクトルを表示した。ここでは、分布関数は速度空間内でフーリエ変換され、そのパワースペクトルを実波数空間に渡って積分した。横軸は速度空間波数  $l$  を示している。また、データは乱流の定常状態において時間平均されている。一見して分かるように、速度空間における大きな構造（つまり分布関数の低次の流体モーメント量）に対応する速度空間波数  $l$  の小さな成分は、衝突周波数によらず一定の分布を示す。このことは、輸送係数が無衝突乱流の値にほぼ等しくなることと対応している。一方、衝突周波数が小さくなるにつれて、分布関数のパワースペクトルは高波数側に広がる。

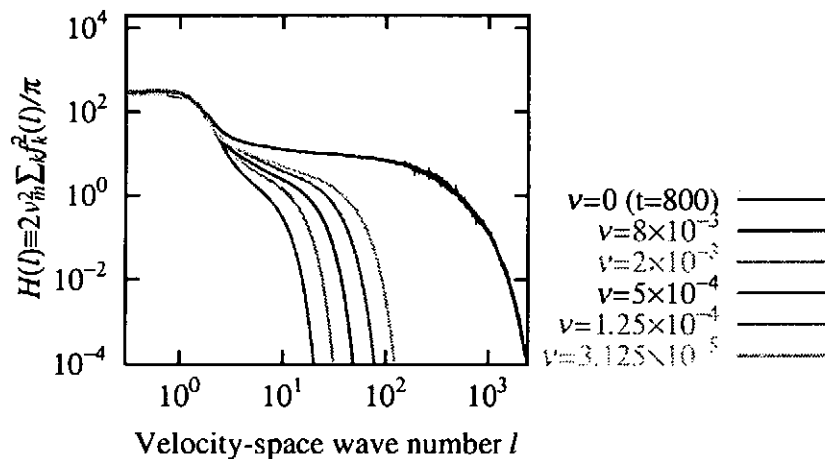


図 2：イオン速度分布関数の速度空間スペクトル。実波数空間については積分した。

ここで重要なのは、無衝突の場合と異なりわずかでも有限の衝突があると、分布関数は定常状態に達し得るということ、また、衝突周波数に応じて高  $I$  側の分布が決められる、という 2 点である。ここで得られた定常分布関数をさらに詳しく解析すると、 $I$  空間において、不安定性により分布関数の揺動が作り出される領域、その揺動が位相混合により高  $I$  側に運ばれる一種の「慣性領域」、揺動が衝突により散逸する領域、がそれぞれ存在することが確かめられた。このことは、流体乱流でよく知られた波数空間内でのエネルギー伝達と対応しており興味深い。

#### 参考文献

- [1] T.H.Watanabe and H.Sugama, *Phys.Plasmas* **9**, 3659 (2002).



## Nonlinear simulation of multi-scaled ITG turbulence in shearless slab geometry

矢木雅敏

九州大学応用力学研究所

[yagi@riam.kyushu-u.ac.jp](mailto:yagi@riam.kyushu-u.ac.jp)

プラズマ中に存在するさまざまなスケールの現象が互いに非線形相互作用し、プラズマの閉じ込め特性を変化させることが認識されつつある。近年、特に異常輸送の研究において違うスケールの現象が相互作用し、お互いの大きさを決定しうることがシミュレーション研究によって明らかになっていた。例えばドリフト波と帯状流の相互作用によりその飽和振幅が決定されるといったことである。ここでは、最近、著者らが提案している短波長に存在するイオン温度勾配不安定性[1]と長波長のイオン温度勾配不安定性に着目し、その相互作用を調べ、輸送特性がどのように変化するかを調べることを目的とする。

簡単のため、シャーの存在しない磁場配位を考える。静電近似のもとで、以下のようなイオンと電子の連続式が得られる[2]。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial n_k}{\partial t} - i\omega_e \zeta_i Z_i \Gamma_{0k} \phi_k + \tau (1 + \zeta_i Z_i \Gamma_{0k}) \frac{\partial \phi_k}{\partial t} - i\eta_i \omega_e \Gamma_{0k} \zeta_i (\zeta_i + \zeta_i^2 Z_i - Z_i / 2) \phi_k \\ & - i\eta_i \omega_e \zeta_i Z_i b_i (\Gamma_{0k} - \Gamma_{1k}) \phi_k + \frac{\tau}{2} \sum_{\mathbf{k}=\mathbf{k}+\mathbf{k}'} \mathbf{z} \cdot \mathbf{k}' \times \mathbf{k}' \Theta_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}'} = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

及び

$$\begin{aligned} & \frac{\partial n_k}{\partial t} - i\omega_e \zeta_e Z_e \phi_k - (1 + \zeta_e Z_e + \lambda^2 k^2) \frac{\partial \phi_k}{\partial t} - i\eta_e \omega_e \zeta_e (\zeta_e + \zeta_e^2 Z_e - Z_e / 2) \phi_k \\ & + \frac{\tau}{2} \sum_{\mathbf{k}=\mathbf{k}+\mathbf{k}'} \mathbf{z} \cdot \mathbf{k}' \times \mathbf{k}' \phi_{\mathbf{k}'} (n_{\mathbf{k}} - \lambda^2 k'^2 \phi_{\mathbf{k}'}) = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

ここで

$$\Theta_{\mathbf{k}} = \chi_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}} + \tau \phi_{\mathbf{k}}) + \eta_i \frac{\omega_e}{\omega} \zeta_i Z_i [(1 - b_i) \Gamma_{0k} + b_i \Gamma_{1k}] (\chi_{\mathbf{k}} - \sigma_{\mathbf{k}}) \tau \phi_{\mathbf{k}}$$

$$\chi_{\mathbf{k}} = \frac{2}{\Gamma_{\mathbf{k}}} \int_0^\infty dx x e^{-x^2} dx J_0(kx) J_0(k'x) J_0(k''x)$$

$$\sigma_{\mathbf{k}} = \frac{2}{(1 - b_i) \Gamma_{0k} + b_i \Gamma_{1k}} \int_0^\infty dx x^3 e^{-x^2} dx J_0(kx) J_0(k'x) J_0(k''x)$$

であり、方程式のクロージャーとして線形のジャイロ運動論的応答を仮定した。また、方程式系は準中性条件を用いてイオンの密度及び静電ポテンシャルに対する

結合方程式として表現しており、イオンのジャイロ周波数  $\Omega_i$ 、イオンのラーマー半径  $\rho_i$  を用いて規格化してある[3]。  $Z_{i,e}$  はプラズマ分散関数、  $\zeta_{i,e} = \omega / (k_{\parallel} v_{thi,the})$ 、  $\Gamma_{0k,ik} = I_{0,i}(b_i) e^{-b_i}$ 、  $b_i = k_{\perp}^2 \rho_i^2 / 2$ 、  $\lambda^2 = (\Omega_i^2 / \omega_{pi}^2) \tau / 2$ 、  $\tau = T_e / T_i$  である[4]。  $\eta_e = \eta_i = 0$  及び  $k_{\parallel} \neq 0$  に対し、  $1 \ll \zeta_e, \zeta_i \ll 1$  の極限でこのシステムはエネルギーを保存する。

$$\frac{d}{dt} \left\{ \sum_{k_{\parallel} \neq 0} \left[ 1 + k^2 \lambda^2 + \tau(1 - \Gamma_{0k}) \right] |\phi_k|^2 + \sum_{k_{\parallel} = 0} \left[ k^2 \lambda^2 + \tau(1 - \Gamma_{0k}) \right] |\phi_k|^2 \right\} = 0 \quad (3)$$

ここで第一項はドリフト波のエネルギーであり、第2項は対流セルのエネルギーを表す。1次元と2次元のポテンシャルエネルギーのスペクトルを

$$E_{\phi}(k_{\parallel}) = \sum_{k_x, k_y} |\phi_k|^2, E_{\phi}(k_x, k_y) = \sum_{k_{\parallel}} |\phi_k|^2 \quad (4)$$

と定義する。

3次元のシミュレーションを以下のようなパラメータを用いて行った。

最小波数： $k_{x0} \rho_i = 0.1$ 、 $k_{y0} \rho_i = 0.1$ 、 $k_{z0} \rho_i = 0.01$ 、フーリエモード数： $8 \times 128 \times 16$   
 パラメータ： $\tau = 1$ 、 $m_i / m_e = 1836$ 、 $\rho_i / L_n = 0.2$ 、 $\rho_i / L_{\parallel} = 0.2$ 、 $\eta_i = 3$ 、 $\eta_e = 3$

図1に(3)式で定義されるドリフト波のエネルギーと対流セルのエネルギーの時間発展を示す。 $t > 250$  で対流セルが非線形的に励起されていることがわかる。図2に1次元のポテンシャルエネルギーの時間発展を  $\Omega_i t = 100, 200, 300, 350$  に対して示す。この図からも明らかかなように対流セルの励起が起こっている。

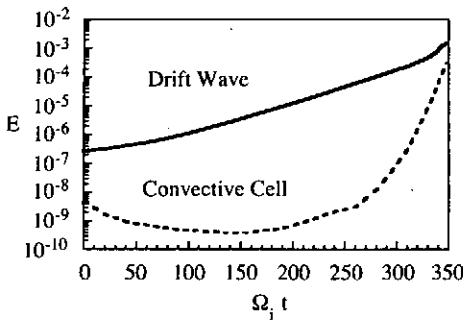


図1

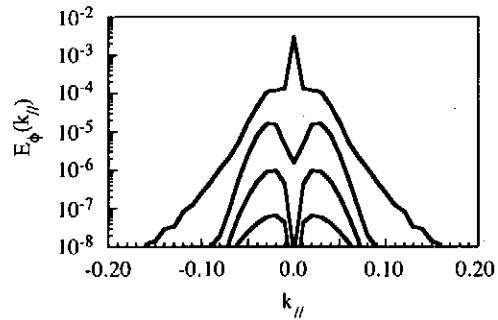


図2

図3に2次元のスペクトルを図2と同じ時間スライスで  $k_x \rho_i = 0.3$  に対して示す。長波長と短波長の2つのピークが観測される。長波長側のピークは逆カスケードによるものと考えられるが、短波長のピークがどのような機構で生じたのかは現段階では明らかでなく、今後の課題である。図4に粒子フラックスの実空間 ( $x, y, z=0$ ) における等高線図を示す。横軸が  $x$ 、縦軸が  $y$  を表す。  $x=0, y=0$  近傍で粒子フラックスが

負の値を示している（ピンチ効果）。 $\eta_e=0$  の場合は粒子フラックスは正の値を示すことから短波長 ITG モードがピンチ効果を作り出していると考えられる。ちなみに熱フラックスはいずれの場合も正となる。

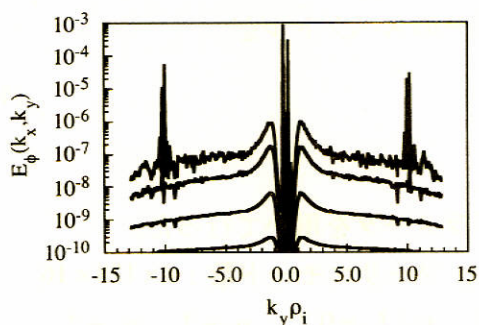


図 3

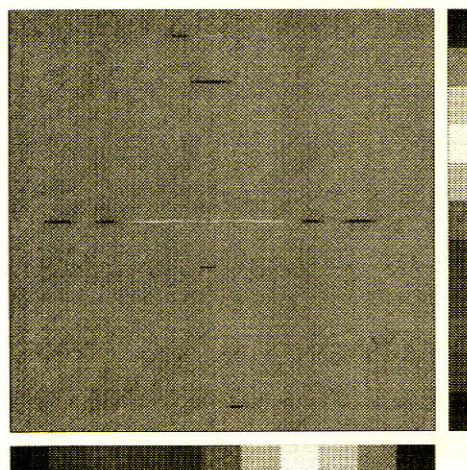


図 4

以上、まとめると2つの違うスケールに存在する ITG 不安定性を考え、その相互作用を調べた。この場合、違うスケールの相互作用により粒子フラックスのピンチ効果が生まれるを明らかにした。今後の課題としては、シャーのある磁場配位やトロイダル形状でどうなるのか調べていく必要がある。

#### 謝辞

この研究の一部は大型シミュレーション研究プロジェクト、US-Japan JIFT program 及び科研費の支援を受けましたのでこの場を借りて感謝いたします。有意義な議論をしていただきましたプリンストンプラズマ物理研究所の C. Z. Cheng 博士、T. S. Hahm 博士、サスカチュワン大学の A. Smolyakov 博士、日本原子力研究所の岸本泰明博士、九州大学の伊藤早苗教授、核融合科学研究所の伊藤公孝教授、京都大学の福山淳教授に感謝いたします。

- [1] A. Smolyakov, M. Yagi and Y. Kishimoto, Phys. Rev. Lett. **89**(2002) 125005.
- [2] M. Yagi, S.-I. Itoh, M. Kawasaki, K. Itoh and A. Fukuyama, 19<sup>th</sup> IAEA Fusion Energy Conference, Lyon, France (2002) TH/1-4.
- [3] C. Z. Cheng and J. R. Johnson, J. Geophys. Res. **104**(1999) 413.
- [4] T. Antonsen and B. Lane, Phys. Fluids **23**(1980) 1205.

# 磁場反転配位における形状緩和と傾斜不安定性

大谷寛明<sup>1)</sup>, 堀内利得<sup>1,2)</sup>, 佐藤哲也<sup>3)</sup>

<sup>1)</sup>核融合科学研究所 (〒509-5292 岐阜県土岐市下石町 322-6)

<sup>2)</sup>総合研究大学院大学 (〒509-5292 岐阜県土岐市下石町 322-6)

<sup>3)</sup>地球シミュレータセンター (〒236-0001 神奈川県横浜市金沢区昭和町 3173-25)

ohtani@tcsc.nifs.ac.jp

## 1. 導入

磁場反転配位 (FRC) プラズマでは, MHD理論によるとアルヴェン時間程度で傾斜不安定性が成長するが, 実験では閉じ込め時間まで安定に FRC プラズマは存在し, 電流の平衡形状は凹型 (ホロー型) が安定に存在する [1,2]. これまで, 多くの拡張 MHD モデルによって, この傾斜不安定性は研究されてきたが, いまだに, 十分な説明はなされていない. また, 3次元電磁粒子シミュレーションによる研究も行われてきたが, このとき初期条件として MHD 平衡が採用されてきた [3,4,5]. しかし, この場合では, 傾斜不安定性の励起と同時に, 系は MHD 平衡配位から運動論的配位へ緩和してしまうので, 運動論的効果が傾斜不安定性の安定化にどのように寄与しているか明確ではない. そこで, 本研究では, まず, 2次元粒子シミュレーションによって, 傾斜モードを励起させずに, MHD 平衡配位から運動論的平衡配位へ系を緩和させる. このとき得られた運動論的配位を初期条件として, 3次元粒子シミュレーションを実行し, 運動論的配位における傾斜不安定性について調べる [6].

## 2. 計算方法

傾斜モードは3次元モードであることを考慮して, まずはじめに軸対称での2次元電磁粒子シミュレーションを実行し, 傾斜不安定性を励起させずに運動論的平衡状態を求める. この2次元シミュレーションでの初期条件には1流体MHD平衡解を採用する. このMHD平衡は, 電流形状パラメータ  $D$ , セパトロリックスでのプラズマベータ値  $\beta_{sp}$ , 有限ラーモア半径パラメータ (運動論的パラメータ)  $\bar{s}$  によって制御される [7]. 初期平均速度は, 反磁性速度と等しい場合 (Case1) と, イオン平均速度が零で電子が全電流を担う場合 (Case2) を考える. 初期のイオン温度と電子温度は等しいとした. 次に, 2次元シミュレーションで得られた運動論的配位を初期条件として3次元電磁粒子シミュレーションを実行し, 傾斜モードに対する運動論的平衡状態の安定性を調べた.

## 3. 形状緩和

2次元シミュレーションの結果から, MHD 平衡配位から運動論的平衡配位への緩和過程を調べる. 図 1(a) は, 磁気中性線  $R$  とセパトロリックス  $r_{sp}$  の半径の時間変化を (a)  $\bar{s} = 1$  と (b)  $\bar{s} = 3$  の場合について示している. 運動論的パラメータが  $\bar{s} = 1$  の場合, シミュレーション開始直後,  $R$  と  $r_{sp}$  は振動数  $\omega \sim 2\omega_{ci}$  で振動し,  $\omega_{ci}t \sim 5\pi$  までに次第に振幅が減少する.  $\beta_{sp}$  は初期値から約 0.3 に急激に変化し, その後, その値を維持している (図 1). この現象は, プラズマの配位が動径方向に振動しながら, MHD 平衡配位から運動論的平衡配位へ緩和していることを示している. 他方, 運動論的パラメータが  $\bar{s} = 3$  の場合, 動径方向の振動は生じず,  $\beta_{sp}$  も初期値を維持している. このことから, 運動論的特性の強いプラズマでは, 初期 MHD 配位と運動論的配位とのエネルギー差が大きいと, 緩和振動が励起されるということがわかった.

図 2 は,  $\bar{s} = 1$  の場合で (a)  $\omega_{ci}t = 0$  と (b)  $\omega_{ci}t = 5\pi$  のときのトロイダル電流密度の動径分布を示している. 緩和振動後, 電子電流密度  $J_c$  は磁気中性線近傍で減少し, セパトロリックス近傍で増加している. このため, 初期に凸型であった電流分布 ( $D < 0$ ) がホロー

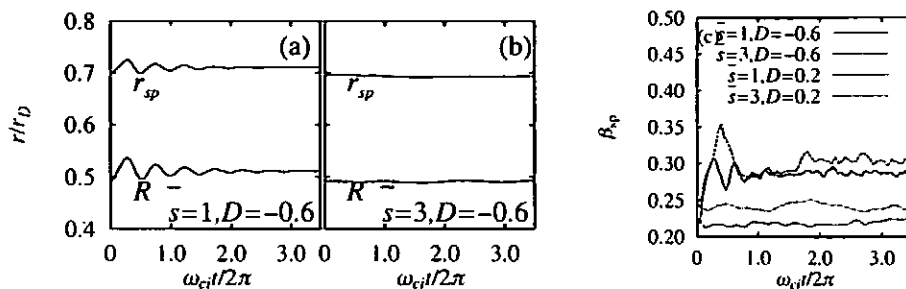


図 1: (a)  $\bar{s} = 1$  と (b)  $\bar{s} = 3$  の場合の磁気中性線  $R$  とセパトトリクス  $r_{sp}$  の半径の時間変化. 及び, (c) セパトトリクスでのプラズマベータ値  $\beta_{sp}$  の時間変化.

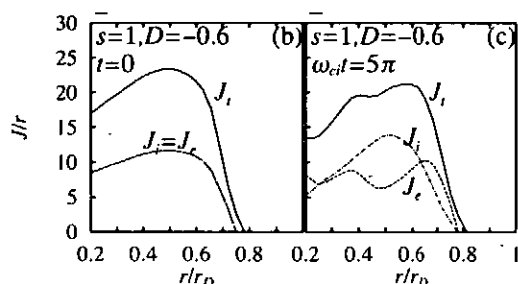


図 2.  $\bar{s}=1$  の場合で (a)  $\omega_{ci}t = 0$  と (b)  $\omega_{ci}t = 5\pi$  のときのトロイダル電流密度の動径分布.

型 ( $\dot{D}_e > 0$ ) に変化している. 他方, イオン電流密度  $J_i$  はより凸型な分布に変化している ( $\dot{D}_i < D < 0$ ). このため, 全電流分布  $J_t$  は磁気中性線近傍でホロー型分布に変化している.

磁気中性線近傍での  $J_e$  の減少と  $J_i$  の増加はともに, 粒子軌道効果によって説明することができる (図. 3). 磁気中性線近傍の電子の運動では磁場勾配ドリフトが重要な役割を果たしている. この磁場勾配ドリフトの符号は電子の反磁性ドリフトと逆なので, 磁気中性線近傍での電子の平均速度は減少し,  $J_e$  は減少する. 他方, FRCプラズマでは磁場の空間スケールがイオンの軌道スケールと同程度なので, イオンは磁気中性線に沿ったメアンダリング運動をする. そのときのトロイダル方向の平均速度が大きいため,  $J_i$  は磁気中性線近傍で増加する.

次にセパトトリクス近傍での  $J_e$  の増加について考える. セパトトリクス近傍の狭

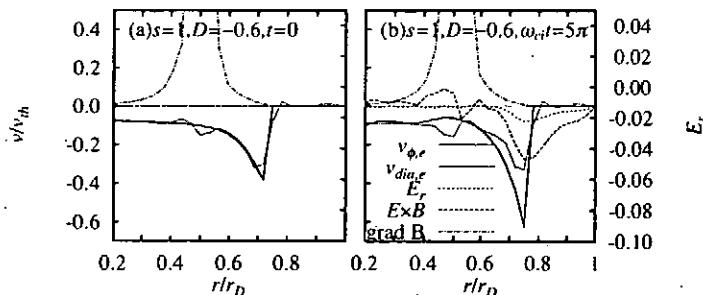


図 3: (a)  $\omega_{ci}t = 0$  と (b)  $\omega_{ci}t = 5\pi$  のときのトロイダル方向の平均速度と各ドリフトの動径分布と動径方向電場の動径分布.

い領域で粒子密度分布が急峻になるため、イオンの有限ラーモア半径効果 (FLR) はその領域に動径方向の強い電場  $E_r$  を形成する (図 3)。このとき生成される  $E \times B$  ドリフトの符号が電子の反磁性ドリフトと同じなので、その領域での  $J_z$  は増加する。他方、イオンのラーモア半径は、生成された電場  $E_r$  が強く働く領域の空間サイズよりも大きいので、この  $E_r$  はイオンの運動にあまり影響を与えない。従って、イオンの電流分布の変化は比較的小さくなる。

このようにして、凸型電流分布を持つ初期 MHD 平衡は、粒子軌道効果と有限ラーモア半径効果によって、ホロー型電流分布を持つ運動論的配位へ緩和することがわかった。電子電流分布がホロー型になり、イオン電流分布が凸型になる傾向は、初期の電流形状パラメータ  $D$  や有限ラーモア半径効果パラメータ  $\bar{s}$  などの初期条件には依存しない。

#### 4. 傾斜不安定性

2次元シミュレーションの結果から、FRCプラズマではホロー型電流分布をもつ運動論的平衡状態が自発的に形成されることがわかった。この節では、この運動論的平衡状態の傾斜モードに対する安定性を3次元シミュレーションの結果から解析する。3次元シミュレーションでは、2次元シミュレーションでの緩和過程後に得られた平衡を初期条件に採用している。

傾斜モードの安定化に関わるいくつかのパラメータについて考える。例えば、プラズマベータ値  $\beta$  やアルベンマッハ数  $M_A$ 、電流形状パラメータ  $D$ 、有限ラーモア半径効果パラメータ  $\bar{s}$  である。これらのパラメータと傾斜モードの成長率  $\gamma_{\text{tilt}}$  との関係性を議論する。

図 4 は、 $\gamma_{\text{tilt}}$  と (a) セパラトリックスでのプラズマベータ値  $\beta_{\text{sp}}$ 、(b) アルベンマッハ数  $M_A$ 、(c) 電子電流形状パラメータ  $D_e$  の関係性を示している。ここで、 $\gamma_{\text{tilt}}$  は MHD シミュレーションで得られた成長率  $\gamma_{\text{MHD}}$  で規格化されている。また、 $M_A$  は、イオンのトロイダル方向の平均速度と磁気中性線でのプラズマ密度、壁での磁場の大きさに関する量である。図 4 を一目見てわかるように、 $\gamma_{\text{tilt}}$  は  $\gamma_{\text{MHD}}$  の 5% から 25% にまで減少している。

$\gamma_{\text{tilt}}$  と  $\beta_{\text{sp}}$  の関係性について考えよう (図 4(a))。  $\beta_{\text{sp}}$  が増加すると  $\gamma_{\text{tilt}}$  は減少する傾向にある。このことは、 $\beta_{\text{sp}}$  が傾斜モードの安定化に関係することを意味する。Nishimura らはこの傾向から、アンカーリングイオンが内部の不安定なプラズマと外部の安定なプラズマをつなぐ役割を果たし、傾斜不安定性に対して系が安定化するというモデルを提案した [3]。

MHD シミュレーションによると、傾斜モードは、 $M_A > 1$  のとき、スピン効果によって安定化する [7]。他方、今回の粒子シミュレーションの結果では (図 4(b))、 $M_A \approx 0.5$  のとき、傾斜モードは安定化している。このことから、この傾斜モードの安定化は、スピン効果では直接説明できないと考えられる。また、 $\gamma_{\text{tilt}}$  と  $M_A$  の関係性が複雑であるため、イオンのトロイダル方向の運動は傾斜モードの安定化には部分的な寄与しかしていないと考えられる。

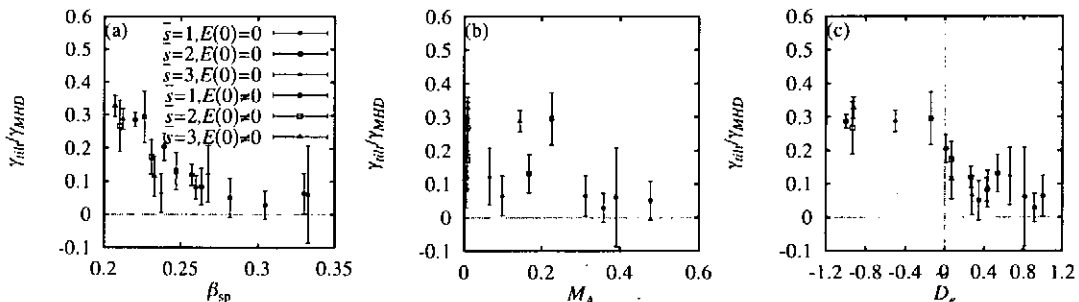


図 4: (a) セパラトリックスでのプラズマベータ値  $\beta_{\text{sp}}$ 、(b) アルベンマッハ数  $M_A$ 、(c) 電子の電流形状パラメータ  $D_e$  に対する傾斜モード成長率  $\gamma_{\text{tilt}}$  の依存性。

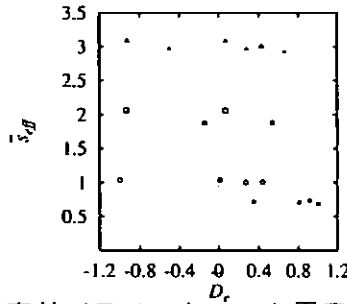


図 5: 有限ラーモア半径効果の実効パラメータ  $\bar{s}_{eff}$  と電子電流形状パラメータ  $\hat{D}_e$  の関係。

図 4(c) では、電子電流分布がホロー型になったとき ( $\hat{D}_e > 0$ )、傾斜モードの成長率は劇的に減少するという、きわめておもしろい結果が得られた。さらに、注目すべき重要な点として、図 4(c) には様々な初期条件から得られた結果が記載されているにもかかわらず、 $\gamma_{tilt}$  と  $\hat{D}_e$  の間には明瞭な関係が存在することが挙げられる。これらの結果は、電子電流密度分布のホロー化と傾斜モードの安定化には密接な関係があることを示唆している。また、この傾向は、Steinhauer と Ishida による実験結果の解析と一致している [2]。

それでは、通常の有限ラーモア半径効果パラメータ  $\bar{s}$  の代わりに有限ラーモア半径効果の実効パラメータ  $\bar{s}_{eff}$  を導入して、傾斜モード成長率の減少と電子電流形状パラメータとの関係を考察しよう。ここで、 $\bar{s}_{eff}$  は、平均イオン速度  $\sqrt{\langle v_i^2 \rangle}$  を用いて、

$$\bar{s}_{eff} = \frac{q_i}{r_{sp} m_i c} \int_R^{r_{sp}} \frac{B_z(r) r dr}{\sqrt{\langle v_i^2 \rangle}}$$

のように定義される。 $\bar{s}_{eff}$  と  $\hat{D}_e$  の関係を図 5 に示す。Case1 の場合の  $\bar{s}_{eff}$  (closed symbols) は、Case2 の場合 (open symbols) より小さい。この傾向は  $\bar{s} = 1$  の場合に顕著であり、このとき、電子電流分布はホロー型であり ( $\hat{D}_e > 0$ )、 $\gamma_{tilt}$  がより小さい値になっている (図 4(c))。これらの結果から示唆されることは、ホロー型の電流分布ではセパラトリックス近傍で大きな電流が流れているため、この電流によって遮蔽効果が生じ、磁気中性線近傍領域のイオンはあまり磁化されていないことである。この磁化されていないイオンが傾斜モードの安定化に効いていると考えられる。

以上のように、3次元シミュレーションの結果から、ホロー型電流分布では傾斜モードは安定化されることがわかった。

## 5. まとめ

磁場反転配位の運動論的平衡の性質を、傾斜不安定性を励起させずに調べるために、2次元電磁粒子シミュレーションを実行した。その後、得られた運動論的平衡を初期配位にして3次元電磁粒子シミュレーションを実行し、運動論的平衡の傾斜モードに対する安定性を調べた。

MHD配位から運動論的平衡へ緩和するとき、緩和振動が励起されることがわかった。この緩和振動後、磁気中性線近傍の磁場勾配ドリフトとセパラトリックス近傍のイオン有限ラーモア半径効果による  $E \times B$  ドリフトによって、電子電流分布はホロー型になり、また、磁気中性線に沿ったイオンのメアングリング運動によって、イオン電流分布は凸型になることがわかった。

ホロー型電流分布の場合、傾斜不安定性の成長は抑制され、凸型電流分布の場合、傾斜不安定性は成長する。その成長率と様々なパラメータとの関係を考察した結果、電子電流形状パラメータとセパラトリックスでのプラズマベータ値が傾斜モードの安定化で重要な役割を果たしていることがわかった。

参考文献

- [1]J. T. Slough et al: Phys. Plasmas **2** 2286 (1995).
- [2]L. C. Steinhauer et al: Phys. Fluids **B 4**, 645 (1992).
- [3]K. Nishimura et al.: Phys. Plasmas **4**, 4035 (1997).
- [4]R. Horiuchi et al.: Nucl. Fusion **39**, 2083 (1999).
- [5]H. Ohtani et al.: JPRF **5**, to be published (2002).
- [6]H. Ohtani et al.: Phys. Plasmas **10**, 145 (2003).
- [7]J. W. Cobb et al.: Phys. Fluids **B5**, 3227 (1993).
- [8]R. Horiuchi et al.: Phys. Fluids **B1** 581 (1981).



# 球状トカマクの非線形MHDシミュレーション

核融合科学研究所

水口直紀, 林 隆也

## 1. 方法

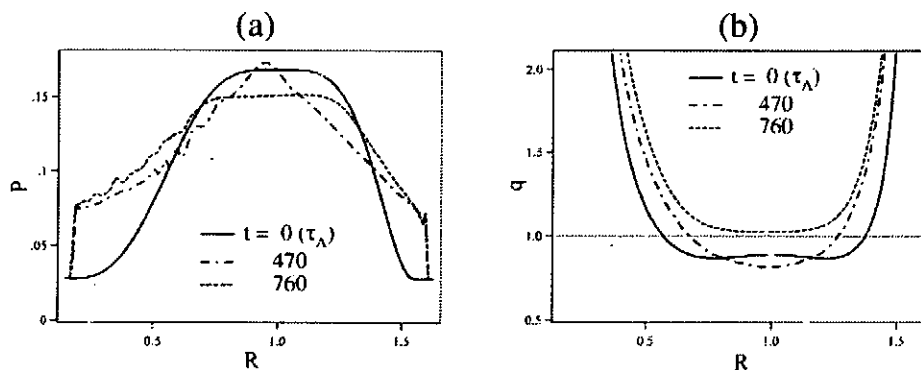
球状トカマクのフルトラスを対象とする。領域を3次元の数値格子に分割し、非線形MHD方程式を4次精度の有限差分法および4次精度のRinge-Kutta法を用いて解く。MHD方程式には電気抵抗、速度粘性、および磁力線方向の速い熱伝導の効果を含む。シミュレーションの初期値には米国NSTX装置における実験結果を用い、装置の形状に合わせて完全導体壁がプラズマに近接するように計算体系を設定した。

## 2. 結果

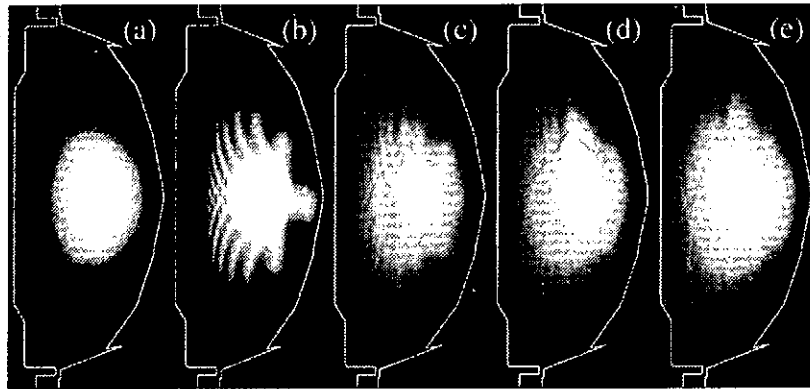
ここでは、バルーニングモードの成長から鋸歯状振動状の圧力崩壊が連続的に引き起こされるシミュレーション結果[1]について説明する。

シミュレーションの初期値には、NSTX実験において、大規模なMHD現象が観測された時刻の測定結果をもとに、EFITコードを用いて再構成された数値平衡解を用いる。この平衡解は、中心部で比較的平坦な圧力分布をもつ[図1(a) $t=0$ ]。また安全係数は中心部で約0.9である[図1(a) $t=0$ ]。初期平衡配位に微小擾乱を与えてシミュレーションを実行すると、有限の電気抵抗がある場合にバルーニングモードが不安定となる。

時間発展を圧力の大きさに応じた濃淡図で表したものが図2である。はじめ[図2(a)]軸対象であったものが、 $n=12$ のバルーニングモードの成分が支配的となって成長し、表面に細かい構造が生じる[図2(b)]。やがて振幅が大きくなって配位が主に周辺部で崩壊する[図2(c)]。このとき、中心部の構造は、ほぼ軸対象のまま残るが、これは $n=12$ バルーニングモードがトラス外側の周辺部にのみ変位が局在するからである。配位全体としては、周辺部が崩壊した影響で、図1の一点鎖線[ $t=470\tau_A$ ]で示したように、中心部で先鋭化した構造となる。そのため、系の安定性が初期値とは大きく異なった状態となる。



[図1](a)圧力, および(b)安全係数の径方向分布の時間変化



[図2]圧力分布の時間発展. 時刻は(a)0(b)200(c)470(d)550(e)760t<sub>A</sub>

引き続き、配位の中程に存在する $q=1$ の内側で、 $m=1/n=1$ のキंकモードが不安定となり、成長をはじめ。これは鋸歯状振動を引き起こす不安定性として良く知られるモードであり、その非線形発展は図2(d)に示すように、プラズマの中心部の高圧力の領域が、ポロイダル面内で大きく外側（図では上方）に向かって大きくシフトするようになる。プラズマ塊が押し付けられた磁気面間で磁気再結合が生じ、やがて速やかにプラズマ塊は左右二手に分かれて画面下方へ流れ、やがて軸対称の配位へと回帰する[図2(e)]。

このように、高 $n$ バルーニングモードを契機として、 $n=1$ キंकモードが連続的に駆動されて内部圧力崩壊が起こる様子を示した。

### 3. 議論

結果で示したように、高 $n$ バルーニングモードに続いて内部で $n=1$ モードが発生し、ベータ・ディスラプションを生じる現象は、トカマク装置において観測されている[2]。モードの発生する時系列、モード成分の空間分布、圧力崩壊の発生といった局面がそれぞれシミュレーション結果と良く一致している。

特に球状トカマクにおいては、IREと呼ばれる、全体形状の大規模な変形を伴った緩和現象をはじめ、通常の鋸歯状振動や破壊的なディスラプション等、多様なMHD現象が観測されている。シミュレーション結果にも、現象の多様性は現れており、今回の結果とは異なる条件下で、IREの発生を再現している[3]。両者の発生機構を比較すると、圧力崩壊を $n=1$ モードが引き起こす点は共通しているが、IREの場合には交換型モードであり、今回の鋸歯状振動の場合はキंकモードである点が異なる。交換型モードは $q=1$ 面上で成長し、非線形発展の結果、外部磁場と内部磁場との間に磁気再結合を生じ、全体形状を大きく変化させる。一方で鋸歯状振動の場合は、モードの成長は $q=1$ 面内で完結し、全体形状の変化は小さい。

### 参考文献

- [1]T. Hayashi, et al., IAEA-FEC(2002), Lyon, IAEA-CM-94/TH/6-3.
- [2]Y. Nagayama, et al., Phys. Fluids B 5(1992), 2571.
- [3]N. Mizuguchi, et al., Phys. Plasmas 7(2000), 940

# アルヴェン固有モード周波数掃引の計算機シミュレーション

藤堂 泰<sup>1)</sup>、篠原孝司<sup>2)</sup>、武智学<sup>2)</sup>、石川正男<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>核融合研、<sup>2)</sup>原研

JT-60U の中性ビーム入射加熱プラズマにおいて、数 ms の間に周波数が上下に 10-20%程度変化しながら成長するアルヴェンモードが観測されており、速い周波数掃引モード(Fast Frequency Sweeping Mode; FFS)と呼ばれている [1]。実験データ(E36379, t=4s)に基づき、Fokker-Planck-MHD シミュレーション[2]を実行した結果、トロイダルモード数が  $n=1$  の図のようなトロイダル・アルヴェン固有モード(TAE)が存在することがわかった。この TAE の固有周波数は 51kHz であり、実験で観測された FFS の中心周波数(=約 50kHz)とよく一致している。

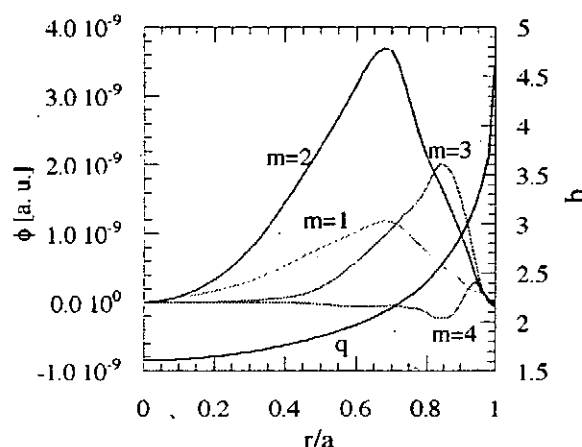


Fig. 1. トロイダルモード数  $n=1$  の TAE の各トロイダルモード分布及び安全係数( $q$ )分布。

この TAE とビームイオンの相互作用を摂動論的シミュレーション[3]を実行して追跡した。ビームイオン駆動によるモード成長率は  $1.0 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$  であった。ここではモード減衰率を  $8.0 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$  に設定した場合の時間発展について報告する。Figure 2 は計算の初めと終わりの磁場揺動の時間発展を示している。短い周期の振動が TAE の固有振動に対応し、その振幅が初期段階 (左図) ではゆっくりと、最終段階 (右図) においては速く振動していることがみてとれる。この磁場揺動の周波数を時間ごとにフーリエ解析し、その時間発展を等高線で示したものが Fig. 3 である。周波数ピークが 2 つに分かれ、時間とともに 2 つのピーク間の周波数間隔が広がり 10ms の間に上下にそれぞれ約 10%変化している。

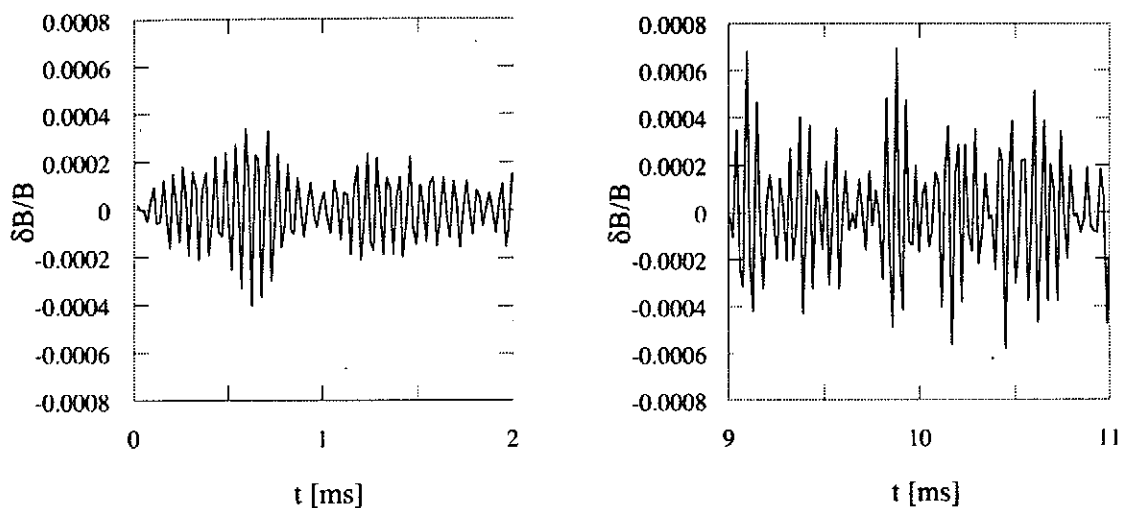


Fig. 2. モード減衰率を成長率の 80%に設定した場合の磁場揺動の時間発展; 計算の初期段階 (左図) と最終段階 (右図)。

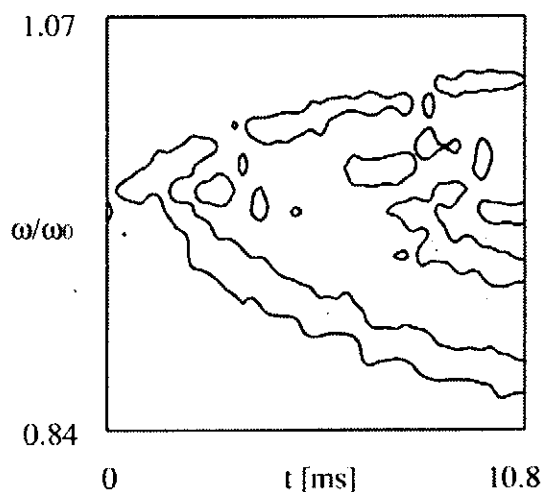


Fig. 3. 磁場揺動周波数スペクトル時間発展の等高線図。等高線レベルは最大値の 40%。

### まとめ

ここで報告した例のようにモード減衰率が成長率に近い場合は、実験と同程度の周波数掃引が起こることがわかった。周波数掃引の物理機構を解明するために、高速イオン分布を詳細に解析することが今後の課題である。

### 参考文献

- [1] K. Shinohara *et al.* Nucl. Fusion **41**, 603 (2001).
- [2] Y. Todo *et al.*, Nucl. Fusion **41**, 1153 (2001).
- [3] Y. Todo, H. L. Berk, and B. N. Breizman, to appear in Fusion Energy 2002, TH/P3-18.

# 両親媒性分子膜の散逸粒子動力学シミュレーション

核融合科学研究所 理論・シミュレーション研究センター

中村浩章

京都工芸繊維大学繊維学部

藤原 進

平成 14 年 12 月

## 1 背景

鎖状高分子の構造形成を分子動力学 (MD) シミュレーションを使って解析を行ってきた [1, 2, 3, 4, 5, 6]。そのシミュレーションより、鎖状分子系の太域配向秩序が形成されるプロセスが、以下のようなことを明らかにした。鎖状分子の配向秩序ができる際には、まず、局所的に配向がそろったドメインを形成し、それらが各々成長する。やがて各ドメインが隣接し、配向秩序の向きを揃えようとドメイン間で競合する。この際、ドメインの大きさ (慣性) に応じて、各ドメインが剛体的に集団で運動し、やがて、より大きなドメインへと合体する。このようなステップを繰り返し、太域配向秩序が形成されていく。

以上の鎖状分子系の構造形成シナリオ研究経験を生かし、さらにより普遍的な自己組織化 (構造形成) 現象のシナリオを導くため、両親媒性分子系が形成する超分子構造形態解明を目指す。

両親媒性分子の形成する二分子膜は、生体膜の主成分である。ゆえに、両親媒性分子膜の構造解明は、物理的な興味ばかりでなく、生体機能発現の仕組みに生体膜のダイナミクスが深く関わっている。生体膜では、両親媒性分子である脂質分子 (数 Å 程度) が集まり、100nm ~ 数  $\mu$  m の“超分子”構造を形成する。その基礎研究として、両親媒性分子の持つミクロの性質が、メソレベルでの超分子の性質に、いかに現れるかを解明することが重要となる。

従来行われている全原子分子動力学 (all-atom MD) シミュレーションでの計算限界は 10 ns 秒、10 nm である。しかし両親媒性分子の超分子構造のダイナミクスは 1  $\mu$  秒、1  $\mu$  m のスケールを持ち、all-atom MD シミュレーションでは不十分である。そこで、大きな時空間を扱えるシミュレーションの開発が必要となる。一方、両親媒性分子を単純化し、かつ、溶媒分子効果を両親媒性分子間の相互作用ポテンシャルに組み込むという、プロトタイプ的なモデル計算で分子膜の構造シミュレーションの報告がある [7]。しかし溶媒を陽に扱わないため圧力等の効果についての知見が得ることができない。そこで、本研究では、両親媒性分子膜を扱いうるメソスコピックシミュレーション経験を積み、両親媒性分

子の超分子構造形成のダイナミクスを解明することを研究目的とする。具体的には、数個の原子を一つの粒子として粗視化を行う Dissipative Particle Dynamics(DPD) 法を用いた [8, 9, 10, 11, 12]。DPD 法は、そもそも流体のメソスケールの計算の為提案され、すでに、両親媒性分子膜の簡単なモデルでの構造形成シミュレーションが行われている [13, 14]。本発表では、当グループの DPD シミュレーションの現状として、途中経過を報告する。

## 2 計算アルゴリズム

両親媒性分子を構成する原子、および、溶媒分子数個を一つの粒子として粗視化して扱う。この粗視化粒子は質量が同じであると仮定する。これは、粗視化の際、各粒子は質量が同じになるように選んだことに相当するし、これは、現実モデルに矛盾しない。

このように選んだ粒子の古典運動方程式を、速度ベルレ法で数値積分しといていく。粒子  $i$  に働く力  $\vec{f}_i$  を次のように仮定する。

$$\vec{f}_i = \sum_{j \neq i} \left( \vec{F}_{ij}^C + \vec{F}_{ij}^R + \vec{F}_{ij}^D \right), \quad (1)$$

ここで、 $\vec{F}_{ij}^C$  は保存力、 $\vec{F}_{ij}^R$  はランダム力、 $\vec{F}_{ij}^D$  は散逸力を各々あらわす。これらは、粒子  $i$  と粒子  $j$  の二体間力であることが、特徴である。さて、さらにこれらの力は具体的には、以下のごとくかける。なお、 $\vec{r}_{ij} \equiv \vec{r}_i - \vec{r}_j$ 、さらに、 $r_{ij} \equiv |\vec{r}_{ij}|$ 、 $\vec{e}_{ij} \equiv \vec{r}_{ij}/r_{ij}$  と定義する。また、カットオフとして  $R_C$  を導入する。

$$\vec{F}_{ij}^C = \begin{cases} -a_{ij}(1 - r_{ij}/R_C)\vec{e}_{ij} & \text{if } r_{ij} < R_C, \\ 0 & \text{if } r_{ij} \geq R_C, \end{cases} \quad (2)$$

$$\vec{F}_{ij}^R = \sigma w(r_{ij})\vec{r}_{ij}\zeta/\sqrt{\delta t}, \quad (3)$$

$$\vec{F}_{ij}^D = -\frac{1}{2kT}\sigma^2 w(r_{ij})^2 (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}) \vec{r}_{ij}, \quad (4)$$

ここで、関数  $w(r)$  は以下の式で書ける。

$$w(r) = \begin{cases} (1 - r) & \text{if } r < R_C, \\ 0 & \text{if } r \geq R_C, \end{cases} \quad (5)$$

さらに、両親媒性分子内で、隣接粒子間には以下のような束縛力が働く。

$$\vec{F}_{ij}^{SS} = a_k(r_{ij} - r_0)\vec{e}_{ij} \text{ if } i \text{ is connected to } j. \quad (6)$$

以上を用いて計算する。尚境界条件としては、周期境界を用いる。

## 3 計算結果

初期条件として、溶媒中に、二分子層として両親媒性分子が配置されている状態 (図 1、左) から計算をスタートする。時間がたつにつれ、二分子層が崩れて、ベシクルが形成される様子が (図 1 右) 観測された。

図中の赤い粒子が、親水基を想定し、白い粒子が疎水基を意味している。

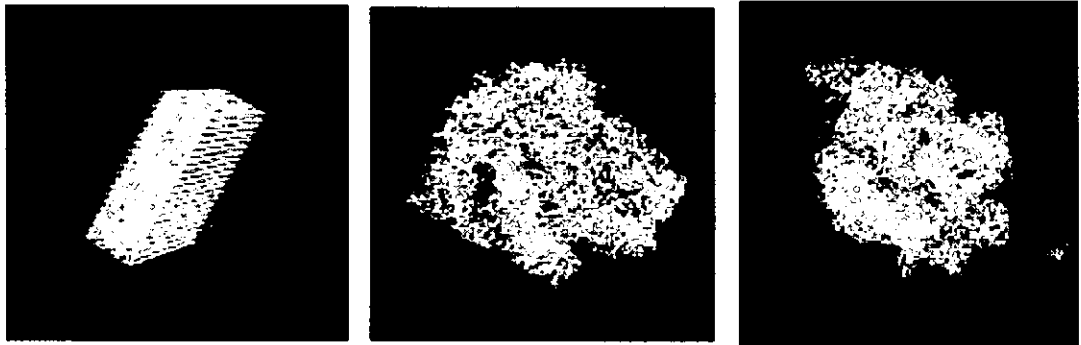


図 1: 両親媒性分子が、集まってベシクルを形成する様子。

#### 4 議論

DPD シミュレーションの途中報告という位置付けで本発表を行った。エネルギーの時間依存性等の物理量を定量的に調べていく必要がある。

#### 参考文献

- [1] S. Fujiwara and T. Sato, Phys. Rev. Lett. **80**, 991 (1998).
- [2] S. Fujiwara and T. Sato, Molecular Simulation **21**, 271 (1999).
- [3] S. Fujiwara and T. Sato, J. Chem. Phys. **110**, 9757 (1999).
- [4] H. Nakamura and S. Fujiwara and T. Sato, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 943 (2001).
- [5] H. Nakamura and S. Fujiwara and T. Sato, Comput. Phys. Comm. **142**, 943 (2001).
- [6] H. Nakamura and S. Fujiwara and T. Sato, Comput. Phys. Comm. **147**, 346 (2001).
- [7] H. Noguchi, J. Chem. Phys. **117**, 8130(2002).
- [8] P. J. Hoogerbrugge and J. M. V. A. Koelman, Europhys. Lett. **19**, 155(1992).
- [9] J. M. V. A. Koelman and P. J. Hoogerbrugge, Europhys. Lett. **21**, 363(1993).
- [10] R. D. Groot and P. B. Warren, J. Chem. Phys. **107**, 4423(1997).
- [11] R. D. Groot and T. J. Madden, J. Chem. Phys. **108**, 8713(1998).
- [12] R. D. Groot and K. L. Rabone, Biophys. J. **81**, 725(2001).

- [13] S. Yamamoto, Y. Maruyama, and S. Hyodo, *J. Chem. Phys.* **116**, 5842(2002).
- [14] Erratum: S. Yamamoto, Y. Maruyama, and S. Hyodo, *J. Chem. Phys.* **117**, 2990(2002).



# 希薄溶液中における高分子構造形成の分子動力学シミュレーション

京都工芸繊維大学繊維学部 藤原 進

## 1. はじめに

ポリ容器やポリ袋などの汎用プラスチックから、我々自身の体を構成しているタンパク質やDNAに至るまで、高分子は我々人間にとって、非常に重要な役割を果たしている。「構成要素に由来する複雑さ」をもつ複雑液体に分類される高分子は、内部自由度が非常に大きいため、多様な構造をとることができる。この構造の多様性が、高分子の持つ様々な機能の基礎となっている。そのため、高分子の構造形成機構を解明することは、学問的に重要であるだけでなく、構造を制御して新機能物質を創造するといった工業的な観点からも、極めて重要な課題である。

高分子構造形成の研究は、これまで数十年以上にわたって行われてきた。それにも関わらず、高分子系特有の実験的困難のため、その構造形成機構の微視的な分子レベルでの解明は、未だほとんどなされていない。このような実験的困難を克服するため、近年、特に1990年代に入って、大規模なコンピュータ・シミュレーションが威力を発揮し始めている。昨今の計算機科学の発展は驚異的なものであり、大規模なコンピュータ・シミュレーション研究の重要性が、ますます認識されつつある。

本研究では特に「構造形成」に着目し、高分子の構造形成機構の解明を通して、様々な系に普遍的に存在する非線形法則を見出すことを究極の目的とする。これまで我々は、鎖状分子の構造形成に関する大規模な分子動力学(MD)シミュレーションを行い、構造形成過程を解析してきた。具体的には、(1) 孤立した一本の高分子鎖 [1-4]、(2) 孤立した多数本の短い鎖状分子 [5-8]、(3) 溶液中における一本の高分子鎖 [9,10] の構造形成に関する研究を行ってきた。ここでは、溶液中における一本の高分子鎖に関する研究成果について述べる。

## 2. シミュレーションモデルと方法

高分子鎖及び溶媒分子のモデルとして、メチレン基が直線上に連結したポリメチレン鎖を用い、メチレン基は1つの質点として扱う。分子力場として Mayo *et al.* [11] の DREIDING ポテンシャルを用いる。MDシミュレーションのアルゴリズムとして、速度 Verlet 法 [12] を用いる。また、系の温度を一定に保つため速度スケールリング法を、系の圧力を一定に保つため Andersen の方法 [13] を適用する。系の圧力は、1気圧に設定した。ここでは、500個のメチレン基から成る1本の高分子鎖及び、6個のメチレン基から成る3747本の溶媒分子を扱う。最初に、高温(550 K)でランダムな配位の高分子溶液を作り、次にそれを様々な温度(400, 350, 300 K)に冷却し、配向秩序構造の形成過程の解析を行う。

## 3. 結果および考察

図1に、300 Kにおける溶液中の一本の高分子鎖の構造の時間発展を示す。初期において、高分子鎖は広がったランダム・コイル状態をとっているが、時間の経過と共に、局所配向秩序領域が形成される [図1(a)]。その後、局所配向秩序領域が成長し [図1(b)、(c)]、最終的に折り畳まれた配向秩序構造を形成することが分かる [図1(d)]。

高分子鎖の大域的配向秩序の成長過程を調べるため、

$$P_2 = \left\langle \frac{3 \cos^2 \psi - 1}{2} \right\rangle$$

で定義される大域的配向秩序パラメータ  $P_2$  を計算する。ここで、 $\psi$  は、二つの弦ベクトル (隣り合った二つのボンドの中心を結ぶベクトル) の間の角度であり、 $\langle \dots \rangle$  は、全ての弦ベクトル対についての平均を表す。このパラメータ  $P_2$  は、全ての弦ベクトルが平行の場合  $P_2 = 1$ 、弦ベクトルが各々ランダムな方向を向いている場合  $P_2 = 0$  となる。図2に、300 Kにおける大域的配向秩序パラメータ  $P_2$

の時間発展を示す。 $P_2$ は $t \approx 0.8$  nsまで増加し約0.4に達する。その後、 $t \approx 1.5$  nsまでの間、ほぼ一定値を取っているが、再び増加を始め、 $t \approx 3.0$  nsで約0.6に達する。つまり、 $t \approx 3.0$  nsで、大域的配向秩序構造が形成される。このように、大域的配向秩序の成長は段階的に進行することが分かる。

様々な初期条件、温度条件においてMDシミュレーションを実行することにより、初期条件によっては中間状態としてトロイド構造が形成されることが分かった。また、溶液中の場合、形成される配向秩序構造のステム長は、真空中の場合より長くなることが明らかになった。

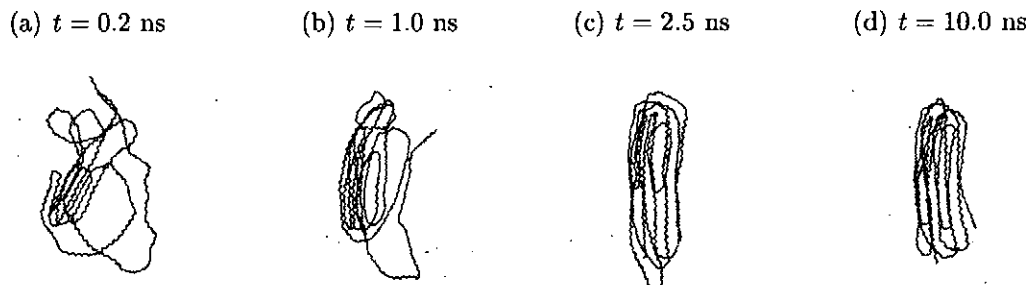


図 1: 300 Kにおける溶液中の一本の高分子鎖の立体配位: (a)  $t = 0.2$  ns、(b)  $t = 1.0$  ns、(c)  $t = 2.5$  ns、(d)  $t = 10.0$  ns。見やすくするため、溶媒分子は描いていない。

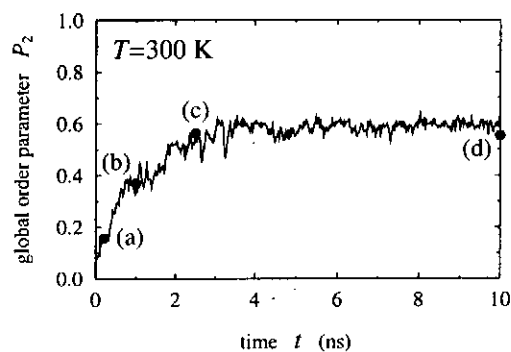


図 2: 300 Kにおける大域的配向秩序パラメータ  $P_2$  の時間発展。点 (a)、(b)、(c)、(d) はそれぞれ、 $t = 0.2$  ns、 $t = 1.0$  ns、 $t = 2.5$  ns、 $t = 10.0$  nsに対応する (図 1 参照)。

#### 4. おわりに

本研究が示す研究結果、すなわち、初期に自由エネルギー的に高い非平衡状態から出発して、系が不連続的に自由エネルギー極小状態に緩和していくという研究結果は、高分子ダイナミクスの解明という成果にとどまらない。このような不連続的緩和は、粒子間相互作用の全く異なるプラズマ系(長距離相互作用系)においても見だされており [14-17]、個々の要素間相互作用の形に依存しない普遍的な現象であるといえる。本研究により、多体集団系における構造形成(自己組織化)の研究に新しい局面が開かれることを期待する。

#### 参考文献

- [1] S. Fujiwara and T. Sato, J. Chem. Phys. **107**, 613 (1997).
- [2] S. Fujiwara and T. Sato, Prog. Theor. Phys. Supplement No. 108, 342 (2000).

- [3] S. Fujiwara and T. Sato, *J. Chem. Phys.* **114**, 6455 (2001).
- [4] S. Fujiwara and T. Sato, *Comput. Phys. Commun.* **142**, 123 (2001).
- [5] S. Fujiwara and T. Sato, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 991 (1998).
- [6] S. Fujiwara and T. Sato, *Molecular Simulation* **21**, 271 (1999).
- [7] S. Fujiwara and T. Sato, *J. Chem. Phys.* **110**, 9757 (1999).
- [8] S. Fujiwara and T. Sato, *J. Plasma Fusion Res. SERIES 2*, 498 (1999).
- [9] S. Fujiwara and T. Sato, *Comput. Phys. Commun.* **147**, 342 (2002).
- [10] S. Fujiwara and T. Sato, *J. Macromol. Sci. - Physics* (印刷中).
- [11] S.L. Mayo, B.D. Olafson and W.A. Goddard III, *J. Phys. Chem.* **94**, 8897 (1990).
- [12] W.C. Swope, H.C. Andersen, P.H. Berens and K.R. Wilson, *J. Chem. Phys.* **76**, 637 (1982).
- [13] H.C. Andersen, *J. Chem. Phys.* **72**, 2384 (1980).
- [14] T. Sato, *Phys. Plasmas* **3**, 2135 (1996).
- [15] T. Sato, *J. Korean Phys. Soc. (Proc. Suppl.)* **31**, S109 (1997).
- [16] T. Sato, *J. Plasma Fusion Res. SERIES 2*, 3 (1999).
- [17] T. Sato and the Complexity Simulation Group, *Prog. Theor. Phys. Supplement* **138**, 657 (2000).

# 固体表面上におけるナノクラスターのロングジャンプ拡散

産業技術総合研究所 基礎素材部門 機能性ナノマテリアル研究グループ

丸山 豊

## 1. はじめに

近年、固体、特にグラファイトなどの表面上において金属ナノクラスターが高速に拡散する事が明かとなり[1]、その機構に関して我々を含め幾つか研究が行われている[2]。これまでに明になったことは、クラスター-基板間の相互作用が弱い場合には、クラスター原子の蒸発凝集や周辺部の原子拡散などによるクラスター拡散ではなく、クラスターそのものが拡散するという事である。また、その運動の軌跡は通常予想される隣接サイト間のみの瞬間的なジャンプによる拡散とは大きく異なり、特徴的な時空間スケールを持たない“べき分布”に従うスティックジャンプによるものであった。ごく最近、統計的に十分長いシミュレーションからこの拡散が、より正確にはべき分布の“すそ”が切断(truncate)された、truncated Levy-walk であることが明かとなっている[3]。

この様にMDシミュレーションにより拡散機構の詳細が解ってきたが、まだ基礎的な問題が残されている。それは、「実験的に得られているアレニウス型温度依存性は本当か？」と言う問題と、もしそれが本当ならば「これまで、井戸中において大半の時間を過ごすことに依る“局所平衡化”の仮定とそれに伴う最隣接井戸間での“無相関で瞬間的なジャンプ”と言う仮定を前提とし、広く実験的にも受け入れられているアレニウスの温度依存性が、本拡散の様に特徴的な時空間スケールを持たないスティックやロングジャンプ運動による場合においてどうして成り立つのか？」と言う疑問である。

本研究では上記疑問を明らかにするため、これまで困難であった長時間MDシミュレーションを単純化されたクラスター-グラファイト表面モデルを用いることにより実現する。計算結果からは、拡散係数の温度依存性が確かにアレニウス型に成り、実験を定性的に再現すること、しかしながらその起源はこれまで一般に信じられてきた表面拡散のジャンプ確率の温度依存性からではなく、むしろ殆ど温度依存しないと考えられて来た平均二乗ジャンプ長から来る事を示す。

## 2. 計算手法

計算機速度が向上したとは言え、多数原子からなる系のダイナミクスを長時間ステップ行うことは現在においても非常に困難である。それゆえ、本研究では現象の本質を失わない範囲でモデルの単純化を行い、図1に示されるような、モデルを得た。

基板表面はグラファイトと同じ周期を持つ以下の  $\cos$  関数で展開されるポテンシャルで表す。

$$\begin{aligned} v_{atom}(x, y) &= E_0 \phi(x, y) \\ &= E_0 (-2/9) \times \left( \cos\left\{k\left[x + \frac{y}{\sqrt{3}}\right]\right\} + \cos\left\{k\frac{2y}{\sqrt{3}}\right\} + \cos\left\{k\left[x - \frac{y}{\sqrt{3}}\right]\right\} \right). \end{aligned}$$



図1. モデルグラファイト表面上における金クラスターのスナップショット

一方、吸着した金クラスターは原子論的モデルで取り扱う。3次元構造を持つクラスター(245個の金原子)では最下層の36原子のみが上式で表される表面を感じる。最近接原子同士はLJポテンシャルで相互作用し、LangevinMD ( $\tau = 100 \text{ ps}$ )で時間発展される最下層原子を通じて基板との熱交換、および内部温度一定化がはかれる。

### 3. 計算結果と議論

図2(a)は500Kにおいて特徴的に見られるクラスター中心位置(x, y)、界面格子間のミスフィット角 $\theta$ の時間変化である。対応するx-y座標の軌跡(b)から分かるようにクラスターは同一サイト付近に留まっていた後[stick; (A)]、突如基板と一見無関係に直線的な回転を伴うジャンプ(滑り拡散) (A-B)をし、再び安定な井戸底にスティック(B)されることが解る。図2(a)に表されているジャンプ持続時間は1 ns程にもおよび、決して井戸の中でスティックして過ごす時間に比べて無視できるような短い(transite)ものでない事が解る。

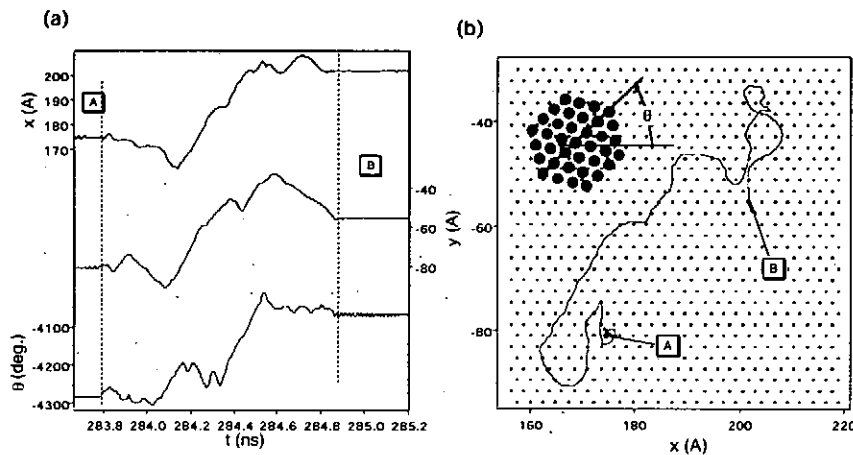


図2 (a)クラスター自由度の時間変化。(b)対応するx-y軌跡。大きな黒丸はクラスターの最下層原子位置を表す。小さな白丸は基板表面における安定位置を表す。

固体結晶表面上における粒子拡散の標準モデルでは、粒子はその多くの時間、安定サイトでスティックして過ごすため局所平衡にあり、エネルギー障壁  $E_a$  で隔てられた隣接サイト間で時空間的に短く、無相関なジャンプをされると考えられている。また、そのジャンプ確率(rate)  $r_j$  は化学反応速度論的過程として、遷移状態理論 (TST) などで適切に記述することが出来るとされる。つまり、おおざっぱには拡散係数  $D$  のいわゆるアレニウス型の温度依存性が得られる理由は、ジャンプ確率  $r_j$  が  $r_j = r_{j0} \exp(-E_a/kT)$  となるためであり、(少なくとも  $E/kT > 1$  となる、即ち低温、あるいは井戸が深い場合には) 実験的にも上記仮定の妥当性が認められているのは良く知られていることである。

で、問題はグラファイト上のナノクラスターではどうなるか? である。

拡散係数  $D$  は良く知られる様に、平均二乗変位  $\langle (\Delta r)^2 \rangle$  の  $t$  が大きいところの傾き  $D = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle (\Delta r)^2 \rangle / 4t$  としても求められるとともに、ジャンプ確率  $h$  と平均二乗ジャンプ距離  $\langle l^2 \rangle$  から  $D = \langle l^2 \rangle h / 4$  としても求められる。

実験的に  $\langle l^2 \rangle$  を精度良く求めるのは至難の業であるが、計算機上では容易い。一方、ジャンプ確率  $h$  をどう捉えるかには多少問題がある。通常は瞬間的なジャンプの後、次のジャンプが起きるまでの平均時間  $\tau$ 、つまり平均スティック持続時間の逆数がジャンプ確率(単位は  $s^{-1}$ ) と考えられている。しかし、金ナノクラスターの表面拡散ではジャンプ持続時

間の頻度分布は有限の時間で truncate されているものの、特徴的な長さのスケールを持たないべき分布であり[2, 3]、スティック持続時間に比べても決して無視し得ない。そのため、ここではジャンプ確率  $h$  は平均ジャンプ持続時間  $\tau_j$  と平均スティック持続時間  $\tau_s$  の和  $\tau$  の逆数  $\tau^{-1} = (\tau_j + \tau_s)^{-1}$  とするのが最も適当であるように思われる。

図3に拡散係数  $D$ 、平均二乗ジャンプ距離  $\langle l^2 \rangle$ 、ジャンプ確率  $h$ 、その逆数である  $\tau$ 、平均ジャンプ持続時間  $\tau_j$  と平均スティック持続時間  $\tau_s$  のいわゆるアレニウスプロットを示す。平均二乗変位の傾きから見積もられる拡散係数は□で示してある。

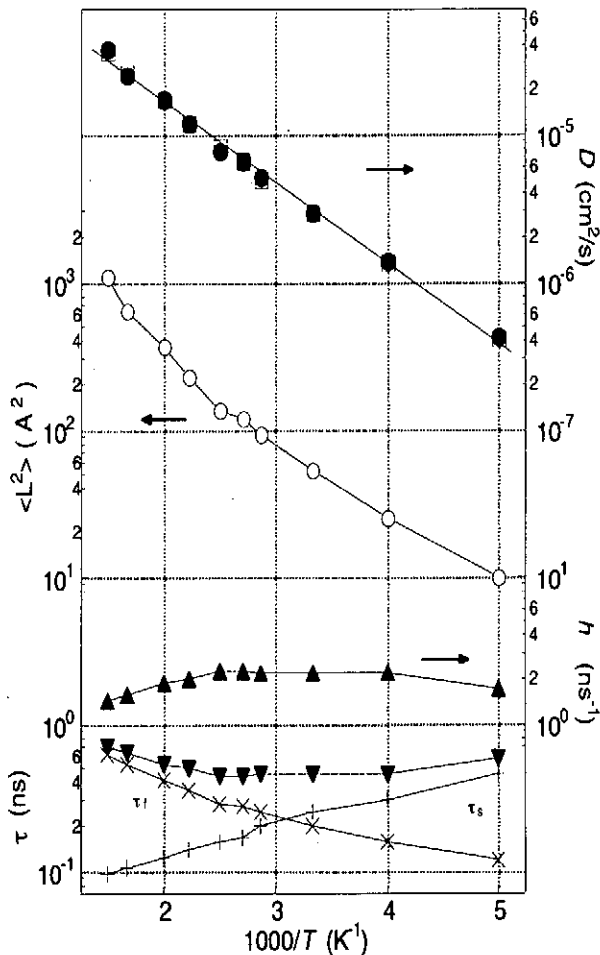


図3. 拡散係数などのアレニウスプロット(本文参照のこと)

二つの拡散係数の温度依存性は共に非常に良く直線に乗っており、実験の報告通りアレニウス温度依存性を示すことが解る。式(2)によるものでは  $E_a = 0.109$  eV、 $D_0 = 2.08 \times 10^{-4}$  cm<sup>2</sup>/s、式(3)によるものでは  $E_a = 0.113$  eV、 $D_0 = 2.45 \times 10^{-4}$  cm<sup>2</sup>/sであった。異なる二つの方法で求められたにも関わらず、両者は非常に良く一致しており、平均二乗ジャンプ距離  $\langle l^2 \rangle$ 、ジャンプ確率  $h$  の見積もりの妥当性を示している。

注目すべきはアレニウス温度依存性の出所である。上でも述べたように、普通なら温度と共にジャンプ確率が急増し、アレニウス性をもたらすはずであるが、逆に高温に成るに従い増加から減少に転じ、全体として殆ど温度に依存しない事が解る。この理由は、図に示されるように、温度が上昇するにつれスティック時間  $\tau_s$  が減るため  $\tau$  も減るが(ジャンプの回数=スティックの回数が増える)、逆に平均ジャンプ持続時間  $\tau_j$  が増えるため  $\tau$  が再び増加するためである。これが単位時間あたりのジャンプの回数に上限をもたらすのである。一方、温度依存性があまりないとされてきた平均二乗ジャンプ長は温度と共に急速に増加する。これは高温になるほど長時間の(したがって長距離の)ジャンプの割合が増えるためである。

通常の表面拡散であればアレニウス性が得

られることは何ら不思議ではなく、むしろ当然のことである。しかしながら、今回の様にジャンプ確率の頭打ちを補うかの様にロングジャンプが頻出し、結果アレニウス性が得られる、というのはこれまでにないものである。この結果は、実験的にアレニウス性が得られたとしても、「井戸があって、バリアーがあれば、それを越えるジャンプ確率が決まって・・・」といったこれまで当然と考えられてきた描像が、特にロングジャンプが頻出する場合には、成り立たない場合がある事を意味する。

#### 4. まとめ

固体表面上におけるナノクラスターの高速表面拡散機構を明らかにするためにグラファイト表面上における金クラスターの計算機シミュレーションを行った。実験で報告されている拡散係数のアレニウス温度依存性を再現する結果を得たが、これまで考えられてきた機構とは正反対のものであることを明らかにした。即ちそれは、ジャンプ頻度の温度依存性を起源にするのではなく、ジャンプ長の温度依存性を起源とするものであった。アレニウス挙動を示すことから、この拡散が広い意味での熱活性化型拡散になっていると言え無くもないが、ジャンプ頻度に由来した、従来型の熱活性化型拡散には当てはまらないことは間違いない。表面拡散の問題は反応速度論や統計性の起源の問題などとも絡む重要な問題であり、今回の結果がナノ系に限らぬ普遍的なものであるかどうかを今後調べたいと考えている。

[ 1 ] L. Bardotti et al., Surf. Sci. 367, 276 (1996) and references therein. [ 2 ] Y. Maruyama, et. al, Rep. Nat. Indust. Res. Inst. of Nagoya 46, 445 (1997). W. D. Luedtke and U. Landman, Phys. Rev. Lett. 82, 3835 (1999). L. J. Lewis, P. Jensen, N. Combe, and J-L. Barrat, Phys. Rev. B 61, 16084 (2000), [ 3 ] Y. Maruyama and J. Murakami Phys. Rev. B in press. (2003).

# Numerical Simulation of Shielding Current Density in HTS by Element-Free Galerkin Method

Atsushi Kamitani<sup>a</sup>, Soichiro Ikuno<sup>b</sup> and Hiroaki Nakamura<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Faculty of Engineering, Yamagata University, Yonezawa, Yamagata 992-8510, JAPAN

<sup>b</sup> School of Engineering, Tokyo University of Technology, Hachioji, Tokyo 192-8580, JAPAN

<sup>c</sup> Theory and Computer Simulation Center, National Institute for Fusion Science, Toki, Gifu 509-5292, JAPAN

**Abstract**—The numerical code for calculating the shielding current density in the high-Tc superconductor is developed by using the element-free Galerkin method. The behavior of the shielding current density is expressed by the integro-differential equations. In order to solve the initial-boundary-value problem of the equations, the equivalent weak form is derived. Since the form satisfies the essential boundary conditions automatically, it is discretized easily. In the numerical code, the resulting nonlinear system is solved at each time step. By means of the code, the spectral analysis of the magnetic field is performed.

## INTRODUCTION

Among the applications of the high-Tc superconductor (HTS), the magnetic levitation and the magnetic shielding have recently become promising. Since the quantitative evaluation of the shielding current density is indispensable for the design of the magnetic levitation system and the magnetic shielding apparatus, various methods [1-3] have been proposed for calculating the shielding current density. However, in all of the methods, the finite element method (FEM) has been employed as the discretization method.

In spite of its quite convenience, the FEM has been plagued by two inherent difficulties: the time consumption of the element generation and the limited smoothness of the approximate solution. In order to resolve the above difficulties, several meshless approaches [4,5] have been proposed.

The purpose of this study is to develop the numerical code for analyzing the time evolution of the shielding current density by using the element-free Galerkin (EFG) method and to perform the spectral analysis of the magnetic field by use of the code.

## GOVERNING EQUATIONS

Let us first assume that the HTS plate has the same cross section through the thickness direction and that it is exposed to the ac magnetic flux density  $B_0 = B_0 \sin 2\pi ft e_z$ . Here,  $e_z$  denotes a unit vector along the z-axis. We further assume the multiple-thin-layer approximation [1] to simulate an anisotropy in the critical current

density of the HTS. In the following, the shielding current density and the electric field in the  $p$ th layer are denoted by  $j_p$  and  $E_p$ , respectively, and  $\Omega$  is the cross section of the HTS plate.

Under the above assumptions, there exists a scalar function  $S_p(x, t)$  such that  $j_p = (1/\epsilon) \nabla S_p \times e_z$  and the behavior of  $j_p$  is governed by the following integro-differential equations [1,2]:

$$\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \sum_{q=1}^M \int_{\Omega} Q_{pq}(|x-x'|) S_q(x', t) dx' + \frac{\mu_0}{\epsilon} \frac{\partial S_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} (B_0 \cdot e_z) + e_z \cdot (\nabla \times E_p) = 0 \quad (p = 1, 2, 3, \dots, M), \quad (1)$$

where  $2\epsilon$  and  $M$  are the layer thickness and the total layer number, respectively, and the explicit form of the function  $Q_{pq}(r)$  is given in [2]. Throughout this study,  $x$  and  $x'$  denote vectors in the  $xy$  plane. In addition, the flux-flow and flux-creep model [1-3] is adopted for the  $J$ - $E$  constitutive relation, and both the flow resistivity  $\rho_f$  and the critical current density  $j_c$  are assumed as constants. By solving (1) with the initial and the boundary conditions, we can investigate the time evolution of  $j_1, j_2, \dots, j_M$ .

## NUMERICAL METHOD

By means of the backward Euler method, (1) can be easily discretized with respect to time. The boundary-value problem of the resulting equations is equivalent to the following weak form:

$$\begin{aligned} & \mu_0 \sum_{p=1}^M \sum_{q=1}^M \int_{\Omega} \int_{\Omega} \delta S_p(x) Q_{pq}(|x-x'|) S_q^n(x') dx' dx \\ & + \frac{\mu_0}{\epsilon} \sum_{p=1}^M \int_{\Omega} \delta S_p S_p^n dx + \Delta t \sum_{p=1}^M \int_{\Omega} E_p^n \cdot (\nabla \delta S_p \times e_z) dx \\ & + \sum_{p=1}^M \int_{\partial\Omega} (\delta S_p \lambda_p + S_p^n \delta \lambda_p) d\ell \\ & = \mu_0 \sum_{p=1}^M \sum_{q=1}^M \int_{\Omega} \int_{\Omega} \delta S_p(x) Q_{pq}(|x-x'|) S_q^{n-1}(x') dx' dx \\ & + \frac{\mu_0}{\epsilon} \sum_{p=1}^M \int_{\Omega} \delta S_p S_p^{n-1} dx - \sum_{p=1}^M \int_{\Omega} \delta S_p [e_z \cdot (B_0^n - B_0^{n-1})] dx \\ & \text{for } \forall \delta S_p, \forall \delta \lambda_p \quad (p = 1, 2, \dots, M), \end{aligned} \quad (2)$$



where the superscript  $n$  indicates the value at time  $t = t^n (= n\Delta t)$ , e.g.,  $S_p^n(x) = S_p(x, t^n)$ . In addition, the Lagrange multiplier  $\lambda_p(s)$  is a function of an arclength  $s$  along  $\partial\Omega$ , and both  $\delta S_p$  and  $\delta \lambda_p$  denote test functions. Note that the essential boundary conditions are incorporated into (2) through Lagrange multipliers. In this sense, the test and the trial functions can be selected arbitrarily.

By using the shape functions of the moving least-squares approximation [4,5], the weak form (2) can be discretized as

$$G(z) \equiv \begin{bmatrix} W & B \\ B^T & O \end{bmatrix} z + \Delta t \begin{bmatrix} e(s) \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix} = 0, \quad \left( z \equiv \begin{bmatrix} s \\ \lambda \end{bmatrix} \right) \quad (3)$$

where the nodal vectors,  $s$ ,  $e(s)$  and  $\lambda$ , correspond to the scalar function  $S_p^n$ , the electric field  $E_p^n$  and the Lagrange multiplier  $\lambda_p$ , respectively, and the matrices,  $W$  and  $B$ , are calculated from the shape functions and the function  $Q_{pp}(r)$ . In addition,  $u$  is a nodal vector irrelevant to  $s$ . As is apparent from (3),  $s$  can be determined by solving the nonlinear system (3). Thus, the initial-boundary-value problem of (1) is reduced to the problem in which the nonlinear system (3) is solved at each time step.

#### NUMERICAL RESULTS

The 3D simulation code for solving the initial-boundary-value problem of (1) has been developed by means of the method explained above. For simplicity, the HTS plate is assumed to have a square cross section of side length  $2a$ , and its thickness is denoted by  $D$ . Throughout this study, the geometrical and the physical parameters are fixed as follows:  $a = 20$  mm,  $D = 2$  mm,  $M = 6$ ,  $f = 100$  Hz,  $\rho_f = 7 \times 10^{-9}$   $\Omega \cdot m$  and  $j_c = 1.3 \times 10^7$  A/m<sup>2</sup>. A typical distribution of the shielding current density is shown in Fig. 1. We see from this figure that the smoother distribution is obtained by using the EFG method. This is mainly because the shape functions are continuously differentiable in the EFG method.

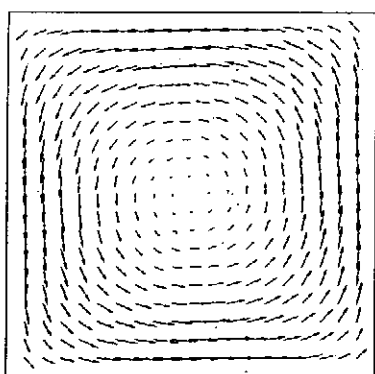


Fig. 1. Spatial distribution of the shielding current density at  $t = 42/(25f)$  for the case with  $B_0 = 1.0$  T. The distribution is calculated at  $z/a = 1/120$ .

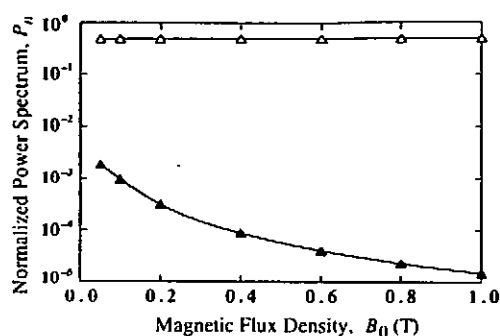


Fig. 2. Dependence of the normalized power spectrum on the applied magnetic flux density. The magnetic flux density is calculated at  $\theta = (0, 0, -0.06)$ .  $\Delta$ :  $n = 1$  and  $\blacktriangle$ :  $n = 3$ . Here,  $n$  denotes the index of the Fourier mode.

Once the spatial distribution of the shielding current density is given, the magnetic flux density can be evaluated at an arbitrary location. After calculating  $z$ -component  $B_z$  of the magnetic flux density at a specific point, we get the time sequence,  $B_{z,0}, B_{z,1}, \dots, B_{z,N-1}$ . By using the FFT algorithm, the sequence is easily transformed to  $\hat{B}_0, \hat{B}_1, \dots, \hat{B}_{N-1}$ .

By using the axisymmetric FEM program, the authors investigated the time variation of the shielding current density in cases where  $\rho_f$  and  $j_c$  depend strongly on  $B$ . Furthermore, they performed the spectral analysis of the generated magnetic flux density to find that the third harmonics are excited abruptly with an increase in  $B_0$  [3]. Such a sudden onset of the third harmonics was also observed in the experiments by Claassen *et al.* [6]. Unlike our earlier work, the  $B$ -dependence of  $\rho_f$  and  $j_c$  is neglected in this study. The power spectrum of the magnetic flux density is calculated by using the 3D code and is depicted in Fig. 2. Although the intensity of the  $n = 1$  mode does not change, the  $n = 3$  mode is weakened with an increase in  $B_0$ . Therefore, we cannot reproduce the sudden onset of the third harmonics numerically if the  $B$ -dependence of  $\rho_f$  and  $j_c$  is neglected. From the above results, we might conclude that its sudden onset is closely related to their  $B$ -dependence.

#### REFERENCES

- [1] Y. Yoshida, M. Uesaka and K. Miya, *Int. J. Appl. Electromagn. Mater.*, vol. 5, pp. 83-89, 1994.
- [2] A. Kamitani and S. Ohshima, *IEICE Trans. Electron.*, vol. E82-C, pp. 766-773, 1999.
- [3] A. Kamitani, K. Hasegawa and T. Yokono, *Physica C*, vol. 378-381, pp. 853-857, 2002.
- [4] T. Belytschko, Y. Y. Lu and L. Gu, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, vol. 37, pp. 229-256, 1994.
- [5] S. N. Atluri and T. Zhu, *Comput. Mech.*, vol. 22, pp. 117-127, 1998.
- [6] J. H. Claassen, M. E. Reeves and R. J. Soulen, Jr., *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 62, pp. 996-1004, 1991.

# Iterative Solution for Linear System Obtained by Meshless Approach

Soichiro Ikuno<sup>a</sup>, Atsushi Kamitani<sup>b</sup> and Hiroaki Nakamura<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Faculty of Engineering, Tokyo University of Technology, Hachioji, Tokyo 192-0982, JAPAN

<sup>b</sup> Faculty of Engineering, Yamagata University, Yonezawa, Yamagata 992-8510, JAPAN

<sup>c</sup> Theory and Computer Simulation Center, National Institute for Fusion Science, Toki, Gifu 504-5292, JAPAN  
e-mail: ikuno@cc.teu.ac.jp

**Abstract**—The iterative solution for the linear system obtained by the meshless approach is investigated. The meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) method is based on the local domain weak form, and the trial and the test functions are taken from the different functional spaces. Consequently, the coefficient matrix of the linear system becomes banded and asymmetric. In this study, BiCGSTAB, GPBiCG and GMRES methods are employed for the solution of the linear system obtained by MLPG method. The results of computations show that the BiCGSTAB and the GPBiCG methods do not give a converged solution in finite iterations. On the other hand, the GMRES method converges after 250 iterations in case of the  $256 \times 256$  linear system.

## INTRODUCTION

The mesh generation procedure must be needed before using the general finite element method (FEM) for the solution of the partial differential equations. However, it costs a lot of time to divide the region into a set of finite elements. Thus, the time required for discretizing the partial differential equation or solving the resulting linear system is much shorter than that for the element generation. On the other hand, the meshless approach does not require finite elements of a geometrical structure. The necessary information is only locations of nodes which are scattered in the region and on the boundary. For these reasons, various meshless approaches have been developed, such as the diffuse element method [1], the Element-Free Galerkin (EFG) method [2] and the Meshless Local Petrov-Galerkin (MLPG) method [3].

Although the MLPG method is one of the meshless approaches, it is widely different from the diffuse element method and the EFG method. The trial and the test functions are taken from the different functional spaces in the MLPG method, whereas they are taken from the same functional space in other meshless approaches. Furthermore, the weak form is derived on the local domain. Consequently, the coefficient matrix of the linear system becomes banded and asymmetric in the MLPG method.

The purpose of the present paper is to apply the BiCGSTAB [4], the GPBiCG [5] and the GMRES [6] to the solution of the linear system obtained by the MLPG method and to elucidate the numerical character of the linear system obtained by MLPG.

## MESHLESS APPROACH

In this section, we derive the weak form of the Poisson problem and discretize it by means of the MLPG method. In this study, we use the rectangular two-dimensional region  $\Omega \equiv [0, 1] \times [0, 1]$  and its boundary is denoted by  $\Gamma$ . The governing equation is expressed as

$$-\Delta u = f, \quad (1)$$

where  $u(x, y)$  and  $f(x, y)$  denote the unknown and the given functions, respectively. Furthermore, the boundary condition is assumed as follows:

$$u = \bar{u}. \quad (2)$$

Here,  $\bar{u}$  denotes the given function.

To approximate the function  $u(x, y)$ , let us first scatter  $M$  nodes in the domain  $\Omega$  and on the boundary  $\Gamma$ , and assign the weight functions with compact supports to the nodes. In this study, the weight function is defined as follows:

$$w_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{e^{(-r_i/c)^2} - e^{-(R/c)^2}}{1 - e^{-(R/c)^2}} & r_i \leq R, \\ 0 & r_i > R. \end{cases} \quad (3)$$

Here,  $R$  denotes the size of the support for the weight function  $w_i(\mathbf{x})$  and  $r_i$  is defined as  $r_i = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|$ . Moreover,  $c$  is a constant. By using the moving least squares (MLS) approximation, the shape functions are given by

$$\phi_i(\mathbf{x}) = \mathbf{p}(\mathbf{x})^T A(\mathbf{x})^{-1} \mathbf{b}_i(\mathbf{x}), \quad (4)$$

where components of the vector  $\mathbf{p}(\mathbf{x})$  are monomials of the space variables,  $x$  and  $y$ . In this study,  $\mathbf{p}(\mathbf{x})^T = [1 \ x \ y \ x^2 \ xy \ y^2]$  is employed for the quadratic MLS approximation. Furthermore, the matrix  $A(\mathbf{x})$  and the vector  $\mathbf{b}_i(\mathbf{x})$  are defined by

$$A(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M w_i(\mathbf{x}) \mathbf{p}(\mathbf{x}_i) \mathbf{p}(\mathbf{x}_i)^T, \quad (5)$$

$$\mathbf{b}_i(\mathbf{x}) = w_i(\mathbf{x}) \mathbf{p}(\mathbf{x}_i). \quad (6)$$

Under the above assumption, the trial function  $u(\mathbf{x})$  can be expanded in the form,

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M u_i \phi_i(\mathbf{x}). \quad (7)$$

In general, the FEM and the EFG are based on the global Galerkin formulation. In this contrast, the MLPG method is essentially based on the weak form over the local sub-domain  $\Omega_i$ . For the sub-domain  $\Omega_i$ , we choose a circle of radius  $R$  whose center is placed at  $\mathbf{x}_i$ . Thus, the sub-domain  $\Omega_i$  agrees with the support of the weight function  $w_i(\mathbf{x})$ . Equation (1) and its associate boundary condition on  $\Gamma_i$  are shown to be equivalent to the following local weighted residual expression:

$$\int_{\Omega_i} (\Delta u - f) w_i d\Omega - \alpha \int_{\Gamma_i} (u - \bar{u}) w_i d\Gamma = 0, \quad (8)$$

where  $u$  is a trial function and  $\alpha$  is a penalty parameter. Besides,  $\Gamma_i$  denotes a part of the boundary  $\Gamma$  which is clipped off by the boundary of  $\Omega_i$ .

Following the standard manners of the MLPG method and the MLS approximation, we can discretize (8) as follows:

$$Bu = f, \quad (9)$$

where the matrix  $B$  and vector  $f$  are defined by

$$(B)_{ij} = \int_{\Omega_i} \nabla w_i \cdot \nabla \phi_j d\Omega + \alpha \int_{\Gamma_i} w_i \phi_j d\Gamma - \int_{\Gamma_i} w_i \frac{\partial \phi_j}{\partial n} d\Gamma, \quad (10)$$

$$(f)_i = \alpha \int_{\Gamma_i} u w_i d\Gamma - \int_{\Gamma_i} f w_i d\Gamma. \quad (11)$$

Here,  $(\ )_{ij}$  and  $(\ )_i$  represent the  $(i, j)$ -th matrix element and the  $i$ -th vector component, respectively. Moreover,  $n$  denotes the unit normal vector whose direction is outward to  $\Omega_i$ . In this way, the solution of the Poisson problem is determined by solving (9) numerically.

#### NUMERICAL RESULTS

As is apparent from (10), the coefficient matrix of the linear system obtained from the MLPG method becomes asymmetric. In addition, it is not clear whether the matrix becomes diagonal-dominant or not. Therefore, the  $LU$  decomposition method or the conjugate gradient (CG) method can be employed for the solution. However, as the number of nodes is increased, the coefficient matrix becomes more sparse. For these reasons, the BiCGSTAB, the GPBiCG and the GMRES methods are employed for the solution of the linear system (9).

In Fig.1, we show the residual histories for the BiCGSTAB and the GPBiCG. Here, the residual norm for the approximate solution  $v$  is defined by

$$r = \frac{\|f - Bv\|_{\infty}}{\|f\|_{\infty}}, \quad (12)$$

where  $\|\ \|_{\infty}$  denotes the infinity norm of the vector. The termination condition for the solver of (9) is  $r \leq 10^{-12}$ . Through the present paper, the size of the linear system is fixed as  $256 \times 256$ . This figure indicates that both the BiCGSTAB and the GPBiCG method do not give a converged solution even after 300 iterations and that the residual behaves irregularly for both methods. This is mainly because the condition number of the coefficient matrix is large due to the penalty parameter. Besides, the coefficient matrix becomes a nearly singular one.

Next, we show the residual histories for the GMRES method. Figure 2 shows that the residual norm stagnates immediately after the restart. On the other hand, in case of  $k = 256$ , the residual norm converges after 250 iterations. Here,  $k$  denotes the restart parameter. Consequently, this figure suggests that the GMRES method without a restart is more effective for the linear system obtained by the MLPG method than the method with a restart or the BiCGSTAB and the GPBiCG method.

From the above results, we can conclude that the BiCGSTAB and the GPBiCG method are unsuitable for the

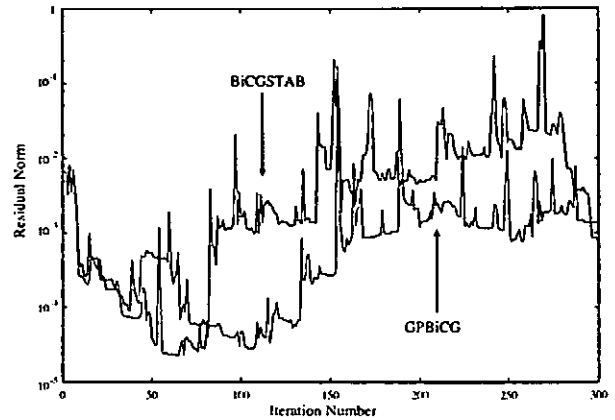


Fig. 1. The residual histories for the BiCGSTAB and the GPBiCG.

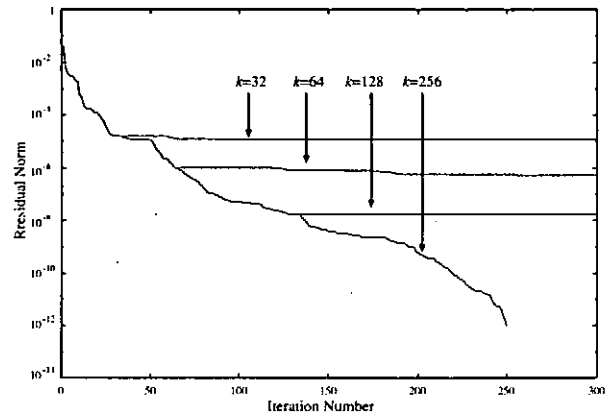


Fig. 2. The residual histories for the GMRES. Here,  $k$  denotes the restart parameter of the GMRES.

linear system obtained by the MLPG. On the other hand, the GMRES method without a restart is effective for the linear system.

#### REFERENCES

- [1] B. Nayroles, G. Touzot and P. Billon, "Generalizing the finite element method: diffuse approximation and diffuse elements," *Comput. Mech.*, vol. 10, pp. 307-318, 1992.
- [2] T. Belytschko, Y. Y. Lu and L. Gu, "Element-free Galerkin methods," *Int. J. Numer. Methods Eng.*, vol. 37, pp. 229-256, 1994.
- [3] S. N. Atluri and T. Zhu, "A new meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) approach in computational mechanics," *Comput. Mech.*, vol. 22, pp. 117-127, 1998.
- [4] H. A. Van Der Vorst, "BI-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of BI-CG for The Solution of Nonsymmetric Linear Systems", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, vol.13, no.2, pp.631-644, March 1992.
- [5] S. L. Zhang "GPBi-CG: Generalized Product-type Methods Based on Bi-CG for Solving Nonsymmetric Linear Systems", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, vol.18, no.2, pp.537-551, March 1997.
- [6] Y. Saad and M. H. Schultz, "GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems," *SIAM. J. Sci. Stat. Comput.*, vol. 7, pp. 856-869, July 1986.

# ヘリカル系プラズマの自由境界 MHD 平衡計算

鈴木康浩 林隆也<sup>1)</sup> 中村祐司 近藤克巳

D. A. Monticello<sup>2)</sup> A. H. Reiman<sup>2)</sup>

京都大学エネルギー科学研究科

<sup>1)</sup>核融合科学研究所

<sup>2)</sup>Princeton Plasma Physics Laboratory

## 1 はじめに

磁場閉じ込め核融合を実現するためには、磁場中に超高温プラズマを安定して閉じ込める必要がある。そのためには、磁場配位が MHD 平衡配位を持たなければならない。MHD 平衡とは、次の方程式が満足されることを言う。

$$\mathbf{J} \times \mathbf{B} = \nabla p \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3)$$

数値計算により MHD 平衡を求める場合、これらの方程式系を解けばよい。

磁場閉じ込め方式として現在最も開発が進んでいるトカマク方式は、プラズマに電流を流すことで回転変換を作り出しプラズマを閉じ込める配位である。この配位は円柱座標系  $(R, \phi, Z)$  においてトロイダル角  $\phi$  方向に対し対称性を持つ軸対称配位である。 $\partial/\partial\phi = 0$  とすると、式 (1)~(3) は Grad-Shafranov 方程式と呼ばれる方程式に簡略化される。

$$R \frac{\partial}{\partial R} \left( \frac{1}{R} \frac{\partial \psi}{\partial R} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} = -\mu_0 R^2 \frac{dp}{d\psi} - F \frac{dF}{d\psi} \quad (4)$$

つまり、トカマク配位である限り、配位の MHD 平衡を計算するには式 (4) を数値的に解けばよい。式 (4) の右辺は非線形であり、計算するためには輸送方程式を解く必要がある。しかし、トカマク平衡はプラズマ電流の径方向プロファイルがポロイダルフラックスの関数として与えられる性質があるために、適当な電流プロファイルを仮定することにより式 (4) を解くことができる。

一方、ヘリカル系プラズマの特徴は、コイル電流が作る磁場により真空中で回転変換を持ち、磁気面が存在する。ヘリカル系プラズマは本質的に 3次元の配位であり、MHD 平衡を計算においてトカマク配位のような Grad-Shafranov 方程式に相当する方程式は存在せず、MHD 平衡解が無数に存在する可能性がある。しかし、Johnson らにより配位のトロイダル方向の変化を逆アスペクト比  $\epsilon$  により摂動展開するステラレータ展開 [1] という手法により Grad-Shafranov 方程式と類似の方程式が導かれた。

この方程式を解くことでヘリカル系プラズマのMHD平衡を計算するSTEPコードも開発された。[2] しかし、このコードは配位の3次元性は考慮に入れているが、MHD平衡を完全に3次元で求めたわけではない。さらに、配位が立体磁気軸のような複雑な形状を持つ場合、高次の摂動が大きくなるためにステラレータ展開そのものの正当性が問題となる。従って、ヘリカル系プラズマのMHD平衡を考察するには、完全3次元のMHD平衡計算コードが必要である。

本研究では、ヘリカル系プラズマのMHD平衡解析に利用されている代表的な計算コードを3種類取り上げ、数値スキームと結果を考察する。

## 2 3次元自由境界MHD平衡計算コード

序論に述べたように、3次元でMHD平衡は無数に存在する。従って、平衡解を計算するためには数値スキームを工夫しなければならない。ここでは、ヘリカル系プラズマのMHD平衡計算に一般的に利用されている3種類の平衡計算コードについて、数値スキームと特徴についてまとめる。

### 2.1 VMECコード

VMECコード[3]は、ヘリカル系プラズマのMHD平衡解析に最も多く利用されているコードで、エネルギー原理によりMHD平衡解を求める。つまり、プラズマ中の全エネルギー、

$$W_p = \int_V \frac{B^2}{2\mu_0} + p dV \quad (5)$$

を変分原理により最小化することで、MHD力の残差 $\mathbf{F} = \mathbf{J} \times \mathbf{B} - \nabla p$ がほぼ0になる時を平衡とする。ヘリカル系プラズマは、多くの場合真空中で入れ子状の磁気面を持つ。そこで、有限圧力下でも入れ子状の磁気面を持つと仮定し、磁気座標系を用いることでさらに計算を効率化させている。しかし、MHD平衡方程式を解いている訳ではないので、得られた平衡解が局所的にMHD平衡を満たさない場合がある。また、磁気座標系を用いることにより、入れ子状の磁気面を持たない配位では正確な平衡解を得ることができない。ヘリカル系プラズマは、連続した一方向の対称性を持たないために、入れ子状の磁気面の存在を保証することができない。VMECコードで平衡解を得るためには、数値スキームを理解した上で適用する必要がある。

### 2.2 HINTコード

HINTコード[4]は、それまでのMHD平衡計算コードとは全く異なる数値スキームのコードである。その特徴は(1)オイラー座標を使用すること、(2)緩和法により平衡解を求めることである。したがって、平衡解が磁気島を持つ持たないにかかわらず、robustに平衡解を求めることが可能となっている。

計算の緩和過程は次の2ステップから成り立っている。まずAステップと呼ばれるステップで次の方程式を満足する圧力分布を計算する。

$$\mathbf{B} \cdot \nabla p = 0 \quad (6)$$

Aステップを計算中は、磁場の時間変化はないものとする。次に、Bステップと呼ばれるステップで、以下の方程式系の時間発展を計算する。

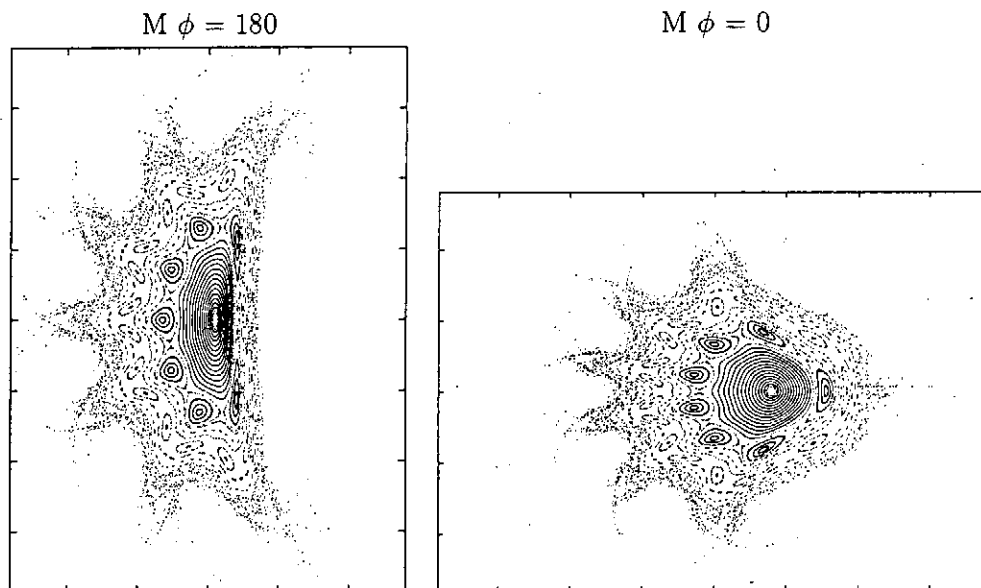
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) = -\nabla p + \mathbf{j} \times \mathbf{B} \quad (7a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B} - \eta(\mathbf{j} - \mathbf{j}_0)) \quad (7b)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} \quad (7c)$$

Bステップの計算中は、Aステップと反対に圧力分布の時間変化はないものとする。AステップとBステップを繰り返し時間発展させることにより、最終的に任意の非平衡を平衡解に緩和させる。緩和が十分に進みプラズマのフローの時間変化  $\partial \mathbf{v} / \partial t \sim 0$  となれば方程式系(7)はMHD平衡を満足する。

HINTコードで Heliotron J 装置 [5] の標準配位を計算した結果を図に示す。結果



は軸上ベータ値が3%の時のものである。入れ子の磁気面を破る磁気島が成長し、周辺の磁力線構造は stochastic になっている。このような平衡は VMEC コードでは計算できない。

## 2.3 PIES コード

PIES コード [6] は、HINT コードと同様に入れ子状の磁気面を仮定することなく如何なる配位も計算できる 3次元 MHD 平衡計算コードである。その特徴は反復法を用いて MHD 平衡方程式を以下のように直接解くことにある。

$$\mathbf{B}^{(n)} \cdot \nabla p = 0 \quad (8a)$$

$$\mathbf{j}_\perp = \mathbf{B}^{(n)} \times \nabla p / B^{(n)2} \quad (8b)$$

$$\mathbf{B}^{(n)} \cdot \nabla (j_{||} / B^{(n)}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_\perp \quad (8c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}^{n+1} = \mathbf{j}^{(n)} \quad (8d)$$

まず、HINT コードと同様に  $\mathbf{B} \cdot \nabla p = 0$  を満たす圧力分布を計算する。次に、得られた圧力分布から平衡電流を計算し直し、その電流から次ステップの磁場を再計算する。これらの方程式系は任意の初期値から出発し、MHD 平衡方程式 (1)~(3) を同時に満たすまで繰り返し反復される。

HINT コード同様に、PIES コードも様々な装置の平衡計算に応用されており高ベータ時の平衡の特性や、磁気島の物理の考察に応用されている。

## 3 まとめ

代表的な 3次元自由境界 MHD 平衡計算コードについて簡単に数値スキームとその違いについてまとめた。それぞれのコードに特徴があり、特に HINT コードと PIES コードは計算する物理は同じにもかかわらず、数値スキームは非常に異なる。また、得られる結果もほぼ同じものであるが、プロファイルを詳細に比較すると若干の差が出る。これが数値的なものであるか、物理を反映したものであるかは、今後詳細に比較する必要がある。

## 参考文献

- [1] J. M. Greene and J. L. Johnson : Phys. Fluids. 4 (1961) 875
- [2] G. Anania, J. L. Johnson and K. Weimer : Phys. Fluids. 26 (1983) 2210
- [3] S. P. Hirshmann, W. I. Van Rij and P. Merkel : Comp. Phys. Comm. 43 (1986) 143
- [4] T. Hayashi, Theory of Fusion Plasmas, EUR 12149 EN(1989)11; K. Harafuji, T. Hayashi and T. Sato : J. Comput. Phys. 81 (1989) 169
- [5] M. Wakatani *et al.* : Nucl. Fusion 40 (2000) 569
- [6] A. Reiman and H. Greenside : Comp. Phys. Comm. 43 (1986) 157

## m/n = 1/1 磁気島をもつ3次元MHD平衡解析

核融合科学研究所

菅野龍太郎、中島徳嘉、岡本正雄、林隆也

m/n=1/1の磁気島をもつ3次元MHD平衡、特に大型ヘリカル装置(LHD)平衡、の解析のための3次元MHD平衡解析コード(HINT)の改良・開発について報告する。(詳細については、参考文献[1]を参照のこと。)このような平衡解析は、現在行われつつあるローカルアイランドダイバータ(LID)実験において有用である。

標準HINTコード[2,3]においては、MHD平衡は、磁力線方向の圧力の緩和過程と磁場の緩和過程をそれぞれ解くことにより与えられる。ここで、圧力の緩和においては、圧力についての情報の磁力線を横切る伝播がなされず、各磁気面や磁気島では、たとえ近接した磁気面同士であっても、それぞれ独立して緩和がなされる。このことより、m/n=1/1の磁気島のように幅が広い磁気島のセパトリクス上とそれと隣り合う磁気面との間では、圧力が不連続になってしまう(図1左)。このことが原因となって、平衡解析の際に力のバランスのエラーが生じ(図1右)、結果、平衡解としての精度が出ないという事態になる(図2の▲)。

このエラーを修正するためには、圧力緩和過程において磁力線を横切るプロセスが必要となる。そこで、圧力の緩和に対して以下のようなプロセスを加える。

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \kappa \nabla \cdot [\nabla p - \mathbf{j} \times \mathbf{B}]$$

この式により、磁気島のセパトリクスにおける圧力の不連続が解消され(図3左)、力のバランスのエラーも小さくなった(図3右)。結果、平衡解の精度が改善された(図2の●)。計算結果のメッシュ依存性は、図2の○と●の比較から分かる。

最終的に得られた平衡解(平衡ベータ値2%)における横長断面における磁力線のポアンカレプロット、Z=0における圧力と回転変換の分布図は、図4のようになる。図4左を見ると分かるように、m/n=1/1磁気島は、周辺が乱れた磁力線構造に取り囲まれている。このことより、コア領域から周辺へ輸送される粒子・熱は、この乱れた磁力線により磁気島に到達せずに壁まで輸送される可能性があると言える。m/n=1/1磁気島を利用したアイランドダイバータの性能の劣化が心配される。今後、さらに詳しい解析を行う予定である。

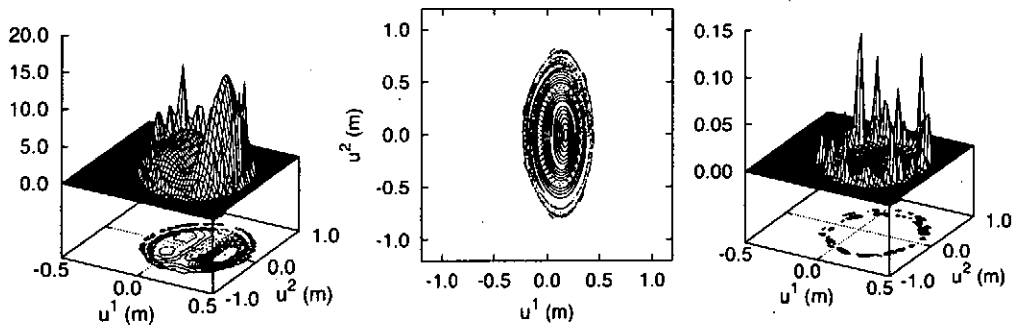


図1. 標準HINTによる、縦長断面における $|\nabla p|^2$ (左)、磁力線のポアンカレプロット(中)、力のバランス( $|\nabla p - \mathbf{j} \times \mathbf{B}|^2$ )のエラー(右)。



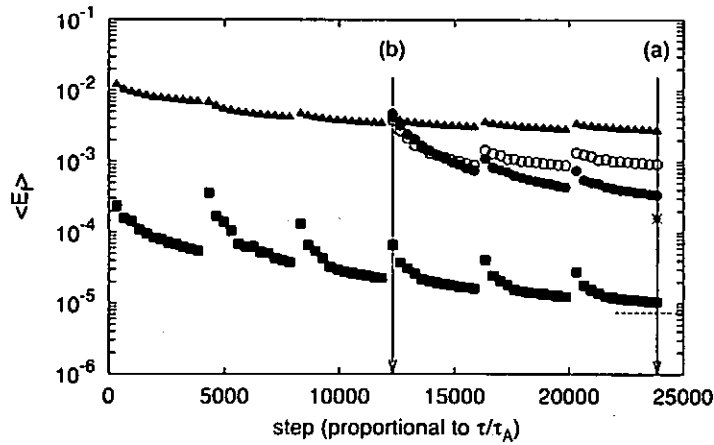


図2. 力のバランスのエラー： $\int dV |\nabla p - j \times B|^2 / \int dV (|\nabla p|^2 + |j \times B|^2)$ 。▲は、標準HINTで  $m/n=1/1$  磁気島ありの平衡について計算したもの。■は、標準HINTで計算した  $m/n=1/1$  磁気島無しの平衡、●と○は、本研究で改良・開発したHINTで計算した  $m/n=1/1$  磁気島ありの平衡についてである。▲、■、●ではメッシュ数が  $97 \times 97 \times 324$  で、○では  $49 \times 49 \times 324$  である。また、--- は、W7Xについて以前計算されたものに対する評価である。

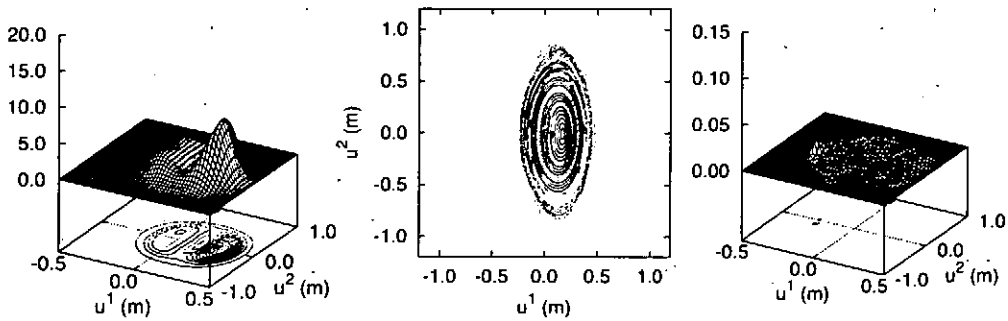


図3. 改良・開発したHINTによる、縦長断面における  $|\nabla p|^2$  (左)、磁力線のポアンカレプロット (中)、力のバランス ( $|\nabla p - j \times B|^2$ ) のエラー (右)。

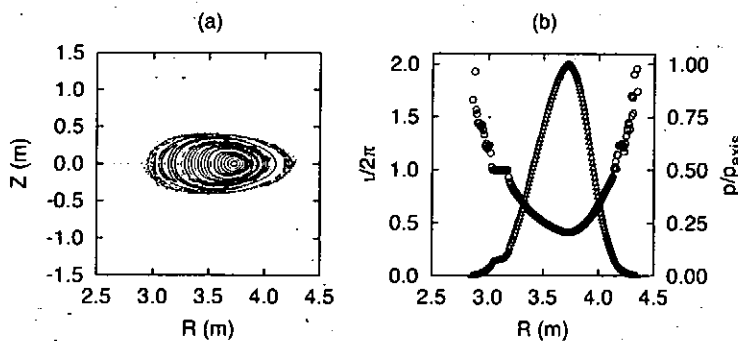


図4. 平衡ベータ値2%の場合における横長断面における磁力線のポアンカレプロット (左) と  $Z=0$  における圧力と回転変換の分布図 (右)。

参考文献：

- [1] R. Kanno, N. Nakajima, M. Okamoto and T. Hayashi, NIFS-767 (2003).
- [2] K. Harafuji, T. Hayashi and T. Sato, J. Comput. Phys. 81, 169 (1989).
- [3] R. Kanno, N. Nakajima, T. Hayashi and M. Okamoto, J. Plasma Phys. 61, 213 (1999).

# LHD プラズマにおける MHD 非線型解析

核融合科学研究所 市口勝治

ヘリオトロンプラズマにはトカマクプラズマのような幾何学的対称性がないので、その MHD 的解析は本質的に三次元的でなければならない。近年、計算機の進歩とともに MHD 方程式を三次元のまま解く数値計算コードも開発されているが [1]、安定性の観点において本質的な性質に着目できるように、三次元効果を取り入れながら MHD 方程式を簡約化する手法が、従来から開発されてきている [2]。以前より、この簡約化 MHD 方程式に基づいて線型安定性解析を行うために RESORM コードを開発し [3]、圧力分布にいくつかのモデル的な滑らかな分布を用いて LHD プラズマの実験結果を予測してきた [4]。ところが、近年の LHD 実験では、理想交換型モードが不安定であろうと予測した磁場配位において、良好な閉じ込めが達成されている。線型計算結果から予想される磁場運動は計測されているが、今のところこれによって達成ベータ値が抑えられてはいない。一見すると、理想モードに対する線型安定性限界を超えたプラズマが存在しているように思われる。この差異を説明するには何らかの安定化メカニズムを考える必要があるが、その一つとして圧力分布の局所平坦化が考えられる。交換型モードは、そのモードが共鳴する有理面での圧力勾配によって駆動されるので、圧力分布が共鳴面近傍において局所的に平坦化していれば、安定化されるはずである。実際、線型解析の結果から、複数の有理面で平坦化しているような階段状の圧力分布が存在すれば、それぞれの面で共鳴する交換型モードが同時に安定化できることが得られている [5]。

さて、このような階段状の圧力分布がプラズマ自身によって達成できるかどうか、重要な問題となる。本研究では、このような圧力分布は、プラズマの非線型発展による自己組織化の結果として得られるのではないかと考えて、上記の簡約化方程式に基づく非線型コード (NORM コード) を開発し、解析を行った。このコードでは、磁気座標系  $(\rho, \theta, \zeta)$  を採用し、動径方向には中心差分、ポロイダルおよびトロイダルの角度方向には RESORM と同様にフーリエ展開を用いた。また、摂動には、multi-helicity を採用して、非線型カップリングにおいては convolution を直接計算するようにしている。

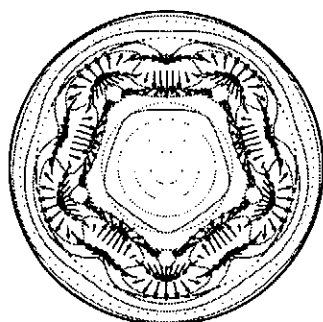


図 1

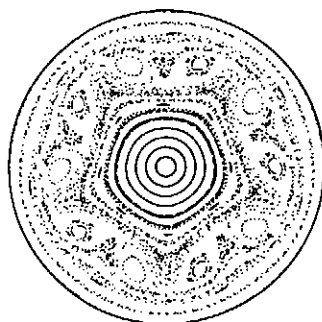


図 2

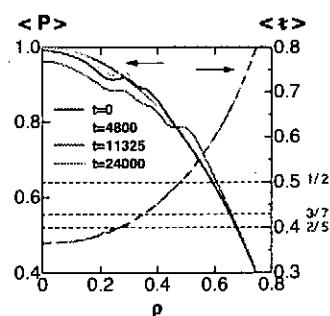


図 3

今回は、このコードを真空磁気軸位置が  $R_{ax} = 3.6\text{m}$  の LHD 配位の低ベータプラズマに適用した [6]。圧力の初期分布として、実験で得られているものに近い

$$P = P_0(1 - \rho^2)(1 - \rho^8) \quad (1)$$

を用い、初期平衡は無電流であると仮定した。この平衡では、中心ベータ値が  $\beta_0 \geq 0.1\%$  で、理想交換型モードが線型不安定となる。そこで、まず、 $\beta_0 = 0.5\%$  のプラズマについて非線型解析を行った。この場合、線型フェーズでは、 $m = 5/n = 2$  モードが支配的である。しかし、このモードは穏やかに非線型飽和を生じた。図1は、このモードが非線型飽和した時刻での、 $\rho \leq 0.4$  の領域での圧力の等高線とフローパターンを示している。これより、ポロイダルモード数の2倍の個数の渦構造の対流によって、プラズマ圧力の高い領域と低い領域が交換されるように輸送され、その結果として、mushroom-like の圧力分布が形成されることがわかる。このとき、同時に、対流によって磁力線が各渦の内側と外側の両側で磁力線を押し付けることになる。従って、この2点において駆動型磁気リコネクションが誘発され、図2に示すように、渦構造に対応した位置に磁気島が形成されることが得られた。さらに、図3( $t=4800$ )に見られるように、この圧力分布構造は、ポロイダル方向に平均的に見ると共鳴面での局所的な平坦化となっている。一方で、このような局所的な平坦化は、その外側の領域の圧力勾配を急峻にすることになる。従って、今度は、この領域にある有理面に共鳴するモードが不安定化されることになる。このようにして、異なる有理面で非線型飽和による局所平坦化が時刻とともに次々と生じてゆく。最終的に全てのモードが飽和した状態では、図3( $t=24000$ )に示されるように圧力分布は階段状となり、線型計算によって予想されたものと同様になることが得られた。

次に、同じ初期圧力分布に対して  $\beta_0 = 1.0\%$  の場合について調べてみた。 $\beta_0 = 0.5\%$  の場合と同様に、線型フェーズでは、 $m = 5/n = 2$  モードが支配的であるが、このモードが飽和した後で、運動エネルギーがバースト的な振舞いを示すことが得られた。このバーストのメカニズムを解明するために、バーストの成長段階での流線図をプロットしたのが図4である。図4(a)はバーストが生じる直前の時刻でのものであり、この段階では、交換型モードに対応する渦は、それぞれの共鳴面の近傍に局在している。図4(b)は、バーストが現れ始めた時刻であり、このあたりから、渦が動径方向に成長し、異なる共鳴面に対する渦どうしが、混じりあうようになってくる。さらに時刻がたつと、図4(c)に見られるように、渦どうしの融合によって、一つの渦が動径方向に大きく広がった形になる。これより、交換型モードによるバースト現象のメカニズムは次のように考えられる。大きなベータ値では、交換型モードを駆動するエネルギーは高くなり、それに応じて、不安定になるモードの数、及び個々のモードのモード幅が大きくなる。そのため、動径方向の異なるヘリシティを持つ渦の融合が生じ、その際に個々の渦の大きさが突然大きくなる。従って、一つの渦が利用できる圧力勾配の自由エネルギーも突発的に大きくなり、それが摂動の運動エネルギーのバーストとして現れることになる。

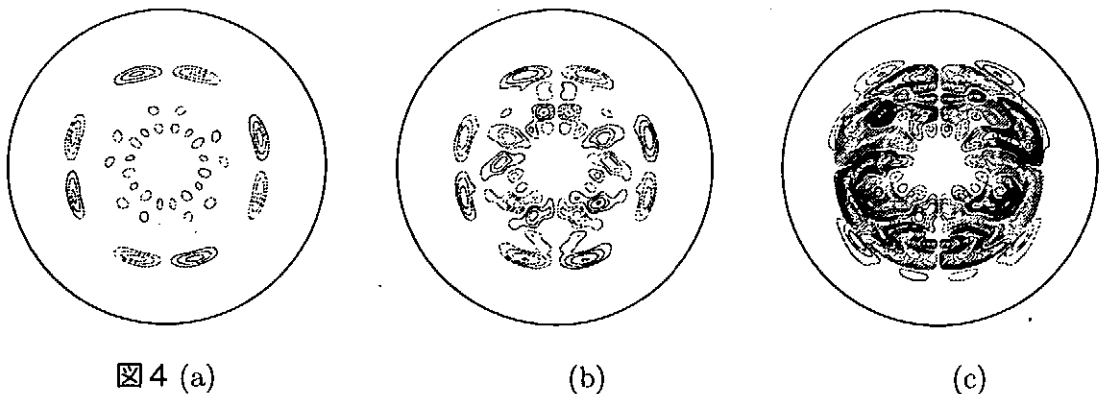


図4 (a)

(b)

(c)

この場合、圧力分布の変動は非常に大きく、磁気軸近傍の圧力は対流によって即座に周辺部へ輸送されてしまう。このような状況は、実際のプラズマでは内部ディスラプションに対応し、ベータ値が制限されると考えられる。ところが、LHDでは、平均ベータ値として3.2%が得られているので、LHDプラズマではこのような状況ではないのではないかと考えられる。一方、実際のプラズマのベータ値上昇過程においては、圧力分布は連続的に変化するはずであり、高いベータ値でのシミュレーションにおいて固定された圧力初期分布を用いるのは、現実的ではない。そこで、実際のベータ値上昇過程に計算をより近づけるために、 $\beta_0 = 0.5\%$  で非線型飽和した圧力分布を  $\beta_0 = 1.0\%$  での非線型計算の初期分布として採用することにした。このとき、ベータ値上昇に伴うプラズマの境界移動の効果を取り入れるために、圧力分布の平均部分だけを取り出し、 $\beta_0 = 1.0\%$  で再計算しものを初期平衡とした。この平衡におけるプラズマの非線型過程は、 $\beta_0 = 0.5\%$  の場合と同様に穏やかな飽和を示すものとなった。これは、あらかじめ、危険な有面近傍での圧力勾配が局所的に平坦化されたために、駆動エネルギーの減少に伴って、交換型モードの成長が抑えられたことによる。

以上の計算により、線型理想交換型モードが不安定なプラズマでも、摂動の非線型発展の過程において、プラズマの自己組織化による圧力分布の局所平坦化によって、内部ディスラプション等の崩壊的な現象が抑制され得ることが得られた。今後、圧力分布の変形等、実験との詳細な比較を行いたいと考えている。

- [1] H.Miura, et al., Phys. Plasmas **8** (2001) 4870.
- [2] H.R.Strauss, Plasma Phys. **22** (1980) 733.
- [3] K.Ichiguchi, et al., Nucl. Fusion **31** (1991) 2073.
- [4] K.Ichiguchi, "Ideal and Resistive Stability of Free-Boundary LHD Equilibria" (Proc. 1999 Intl. Stellarator Workshop, Madison, 1999), CD-ROM file P2-4 (2000).
- [5] K.Ichiguchi, et al., Nucl. Fusion **41** (2001) 181.
- [6] K.Ichiguchi, et al., submitted to Nucl. Fusion.

# LHD フルトーラスシステムの非線形 MHD シミュレーション

核融合科学研究所 三浦英昭

LHD に代表されるヘリカル系核融合実験装置において、プラズマ閉じ込めに最も影響を与える MHD 不安定性の一つはバルーニング不安定性である。バルーニングモードは 3 次元的な性質が強く、その挙動を調べるためには、方程式に大アスペクト比近似などを行なうことなく 3 次元形状をそのまま扱えるシミュレーションが適切である。この観点から、MHD 方程式を LHD システムの 3 次元形状に沿った一般座標系 (ヘリカル座標系) で表現する非線形 MHD 方程式シミュレーションコードを開発し、研究を行ってきた<sup>1)</sup>。ここでは、最近のシミュレーション結果から抵抗性バルーニングモードの発生について報告する。

我々のシミュレーションでは、ヘリカル座標系で記述した MHD 方程式に現れる空間微分を 4 次の中心差分法で評価し、ルンゲ・クッタ・ジル法を用いて時間発展を行う。初期条件は HINT コード<sup>2)</sup> で作成した。初期条件の真空磁気軸の位置は  $R_{ax} = 3.6m$ 、初期圧力分布は  $p(\psi) = (1 - \psi)^2$  で与え、初期の中心  $\beta$  は、 $\beta_0 = 4\%$  である。ただし、 $\psi$  は初期のトロイダルフラックスである。この初期条件の様子を図 1 に示す。図 1(a),(b) は、それぞれ横長、縦長ポロイダル断面における磁力線のポアンカレプロットを、(c) は平均小半径を横軸とする回轉變換値を、(d) および (e) はそれぞれポロイダル断面上での圧力、トロイダル電流の鳥瞰図である。この初期条件はヘリカル対称性を有しており、以下、このヘリカル対称性を課した系をハーフピッチシステム、課していない系をフルトーラスシステムと呼ぶ。

図 1 の初期条件からシミュレーションを始めると、プラズマは不安定性による変形を始める。この不安定性の成長の指標の一つとして、運動エネルギーの空間平均  $K$  の時間発展を調べる。図 2 では、2 つの抵抗率  $\eta = 1 \times 10^{-6}$ ,  $5.16 \times 10^{-6}$  について、ハーフピッチシステム (図中 H の名称付き) とフルトーラスシステム (図中 F の名称付き) の  $K$  の時間発展を比較した。この図から、フルトーラスシステムの方がハーフピッチシステムより運動エネルギー  $K$  の飽和レベルが高く、プラズマに大変形をもたらしがちであることがわかる。この運動エネルギーの成長をもたらす不安定性は、これまでの研究から抵抗性バルーニングモードであると考えらる<sup>1)</sup>。

図 3 には、フルトーラスシミュレーション ( $\eta = 5.16 \times 10^{-6}$ ) における運動エネルギーがピークとなる時刻における圧力分布を等高線で示した。図 3(a),(b) とともに、トーラス外側は図の左側にある。文献<sup>1)</sup> に示したヘリカル対称性のある MHD プラズマではポロイダル ( $m$ )/ トロイダル ( $n$ ) = 16/10 のフーリエモードが卓越したが、ここに示すフルトーラスシステムでは、 $m/n=2/1$  モードが卓越していることがわかる。なお、圧力の等高線の他に、同心円状の線が 2 本引かれているが、これは回轉變換が  $1/2$  および  $2/3$  の磁気面の位置を示している。時系列解析から、初期の不安定性は  $m/n=16/10$  モードが、初期条件において最も圧力勾配の急峻な回轉變換  $2/3$  の位置で発生するが、すぐに低  $m/n$  モードが卓越し、主に回轉變換が  $1/2$  の位置に圧力変形が局在する。

図 4 には、図 3 と同じポロイダル断面での圧力の等高帯に、同じ面上での速度成分を用いて描いた射影流線を重ねたものである。この射影流線はトロイダル方向の速度成分を無視して描いているために実際の流線とは異なるが、ポロイダル断面での速度変動をよく表している。射影流線はポロイダル面内に、反対方向に回転する渦対が 2 組表していることを明確に示して

いる。この反対方向回転の渦対は、お互いを移流しながら並進運動する性質があり、この場合にはプラズマ中心部から周辺部へと向かう。これに合わせて、高圧力分布領域もプラズマ周辺部へと移流され、マッシュルーム構造を形成していることがわかる。このように、バルーニングモードの成長で誘起された  $m/n=2/1$  モードの運動はプラズマを中心部から周辺部へと輸送する効果があり、LHD中のプラズマの時間発展に大きな役割を果たしていると考えられる。

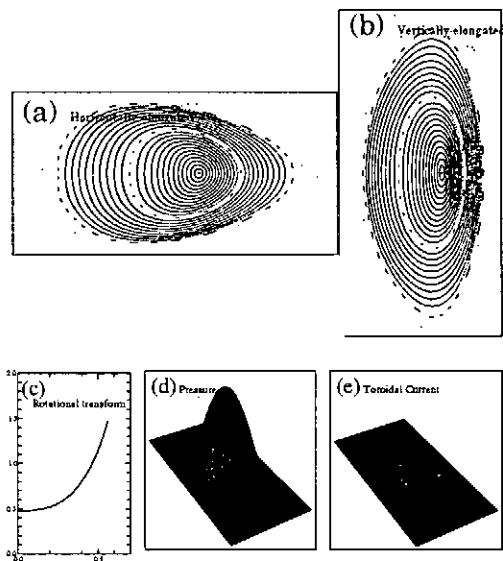


Figure 1: シミュレーションの初期状態。この初期状態は、理想MHDに対する平衡解になっている。

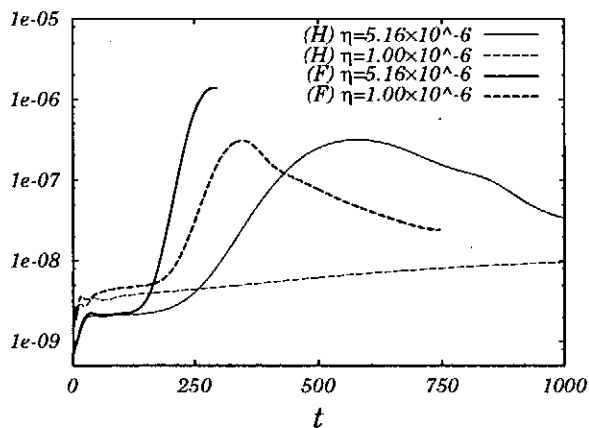


Figure 2: ハーフピッチシステム (H) 及びフルトーラスシステム (F) におけるプラズマの運動エネルギーの空間平均値の時間発展。

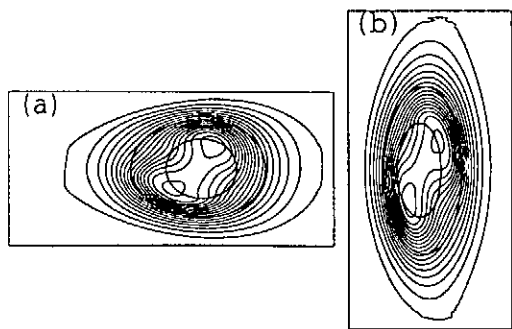


Figure 3: 横長 (a) および縦長 (b) ポロイダル断面上での圧力の等高線。

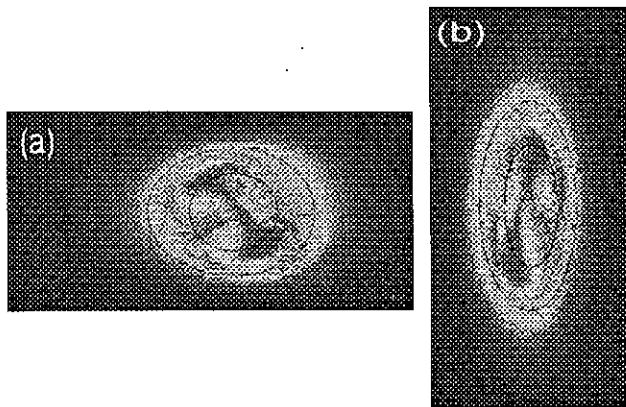


Figure 4: 図3と同一面上での圧力等高帯と、ポロイダル断面上での射影流線。

本稿ではLHDフルトーラスシステムにおけるバルーニングモードの成長に伴う、マッシュルーム状圧力分布の形成について報告した。本研究は、核融合科学研究所理論・シミュレーション研究センターのスーパーコンピュータSX-4/64M2(現在はSX-7に更新)を用いて行われた。

1) H. Miura, T. Hayashi and T. Sato, Phys. Plasmas, 8 (2001) pp.4870-4878.

2) H. Harafuji, T. Hayashi and T. Sato, J. Comp. Phys., 81 (1989) pp.169-192.

## Recent Issues of NIFS-PROC Series

- NIFS-PROC-32 代表者 河合 良信  
平成8年度 核融合科学研究所共同研究 研究会報告「プラズマ中のカオスとその周辺非線形現象」  
Y. Kawai (Ed)  
Report of the Meeting on Chaotic Phenomena in Plasmas and Beyond, 1996: Apr. 1997 (mainly in Japanese)
- NIFS-PROC-33 H. Sanuki.  
Studies on Wave Analysis and Electric Field in Plasmas: July 1997
- NIFS-PROC-34 プラズマ対向機器・PSI・熱・粒子制御合同研究会報告  
平成9年6月27日(金)9:00~16:20 核融合科学研究所・管理棟4F第1会議室  
1997年10月  
T. Yamashina (Hokkaido University)  
Plasma Facing Components, PSI and Heat/Particle Control June 27, 1997, National Institute for Fusion Science T. Yamashina (Hokkaido University) : Oct. 1997 (in Japanese)
- NIFS-PROC-35 T. Watari,  
Plasma Heating and Current Drive: Oct. 1997
- NIFS-PROC-36 T. Miyamoto and K. Takasugi (Eds.)  
Production and Physics of High Energy Density Plasma: Production and Physics of High Energy Density Plasma: Oct. 1997
- NIFS-PROC-37 (Eds.) T. Fujimoto, P. Beiersdorfer,  
Proceedings of the Japan-US Workshop on Plasma Polarization Spectroscopy and The International Seminar on Plasma Polarization Spectroscopy  
January 26-28, 1998, Kyoto: June 1998
- NIFS-PROC-38 (Eds.) Y. Tomita, Y. Nakamura and T. Hayashi,  
Proceedings of the Second Asian Pacific Plasma Theory Conference APPTC '97, January 26-28, 1998, Kyoto: Aug. 1998
- NIFS-PROC-39 (Ed.) K. Hirano,  
Production, Diagnostics and Application of High Energy Density Plasmas: Dec. 1998
- NIFS-PROC-40 研究代表者 加古 孝 (電気通信大学)  
所内世話人 渡辺 二太  
平成10年度核融合科学研究所共同研究 研究会「プラズマ閉じ込めに関連する数値計算手法の研究」  
Ed. by T. Kako and T. Watanabe  
Proceeding of 1998-Workshop on MHD Computations "Study on Numerical Methods Related to Plasma Confinement Apr. 1999
- NIFS-PROC-41 (Eds.) S. Goto and S. Yoshimura,  
Proceedings of The US-Japan Workshop and The Satellite Meeting of ITC-9 on Physics of High Beta Plasma Confinement in Innovative Fusion  
System, Dec. 14-15, 1998, NIFS, Toki: Apr. 1999
- NIFS-PROC-42 (Eds.) H. Akiyama and S. Katsuki,  
Physics and Applications of High Temperature and Dense Plasmas Produced by Pulsed Power: Aug. 1999
- NIFS-PROC-43 (Ed.) M. Tanaka,  
Structure Formation and Function of Gaseous, Biological and Strongly Coupled Plasmas: Sep. 1999
- NIFS-PROC-44 (Ed.) T. Kato and I. Murakami,  
Proceedings of the International Seminar on Atomic Processes in Plasmas, July 29-30, 1999, Toki, Japan: Jan. 2000
- NIFS-PROC-45 (Eds.) K. Yatsui and W. Jiang,  
Physics and Applications of Extreme Energy-Density State, Nov. 25-26, 1999, NIFS: Mar. 2000
- NIFS-PROC-46 研究代表者 加古 孝 (電気通信大学)  
所内世話人 渡辺 二太  
平成11年度核融合科学研究所共同研究 研究会「プラズマ閉じ込めに関連する数値計算手法の研究」  
Ed. by T. Kako and T. Watanabe  
Proceeding of 1999-Workshop on MHD Computations "Study on Numerical Methods Related to Plasma Confinement June. 2000
- NIFS-PROC-47 岡本正雄、村上定義、中島徳嘉、汪衛生  
プラズマ物理におけるモンテカルロシミュレーション  
Watanabe M., Okamoto, S., Murakami, N., Nakajima, W., X. Wang,  
Monte Carlo Simulations for Plasma Physics: July 2000
- NIFS-PROC-48 K. Miyamoto,  
Fundamentals of Plasma Physics and Controlled Fusion: Oct. 2000
- NIFS-PROC-49 (Ed.) K. Kawahata,  
Proceeding of the 5th International Workshop on Reflectometry, 5-7 March, 2001: May 2001
- NIFS-PROC-50 (Ed.) S. Ishii  
Workshop on Extremely High Energy Density Plasmas and Their Diagnostics, Mar. 8-9, 2001, National Institute for Fusion Science, Toki, Japan:  
Sep. 2001
- NIFS-PROC-51 (Ed.) K. Horioka,  
Physics and Applications of High Energy Density Plasmas -Extreme state driven by pulsed electromagnetic energy, Dec. 20-21, 2001, National  
Institute for Fusion Science: June 2002
- NIFS-PROC-52 第6回「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」及び核融合科学研究所共同研究「大型シミュレーション研究」  
合同研究会 集録  
Proceedings of Joing Meeting of the 6th Simulation Science Symposium and the NIFS Collaboration Research "Large Scale Computer  
Simulation": Mar. 2003